

Über Lagen - Anomalien bei Kikuchi - Linien

INAUGURAL-DISSERTATION

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Freien Universität Berlin

vorgelegt von

Gustaf-Adolf Thielen

aus Berlin

1969



Digitized by the Internet Archive
in 2026

Über Lagen - Anomalien bei Kikuchi - Linien

INAUGURAL-DISSERTATION

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Freien Universität Berlin

vorgelegt von

Gustaf-Adolf Thielen

aus Berlin



1. Referent: Prof. Dr. H. Niehrs

2. Referent: Prof. Dr. W. Stein

Tag der mündlichen Prüfung: 13.12.1967

Tag der Promotion:

1. MAI 1969

Inhaltsverzeichnis

	Seite
I. Einleitung	1
II. Die Intensität im Zweistrahlfall der dynamischen Theorie	5
III. Diskussion des Intensitätsverlaufs quer zu den Kikuchiliniien ohne Berücksichtigung störender Nebenbeugungen	9
IV. Die Intensität im Zweistrahlfall mit Berück- sichtigung störender Nebenbeugungen	14
V. Die Hauptlinie	17
VI. Die Nebenlinien	21
VII. Koordinatendarstellung	28
VIII. Interpretation der Ergebnisse	33
IX. Geltungsbereich und Güte der Betheschen Näherung ..	39
X. Vergleich mit vorliegenden Beobachtungen	44
XI. Mehrfache Umweganregung	53
Zusammenfassung	65
Literaturverzeichnis	66

I. Einleitung

Die im Elektronenbeugungsdiagramm gut ausgebildeter Einkristalle paarweise parallel auftretenden Kikuchilinen sind die Schnittkurven sehr weit geöffneter Interferenzkegel mit der photographischen Platte. Zuerst wurden sie bei senkrechter Durchstrahlung etwa 1000 Å dicker Glimmerplättchen mit parallelem Elektronenlicht gefunden.¹⁾ Je größer die Dicke der bestrahlten Objekte, desto deutlicher treten die Linien gegenüber den Punktreflexen zutage, teils heller, teils dunkler als der diffuse Streuuntergrund.

Später haben W.KOSSEL und G.MÖLLENSTEDT²⁾ ein zum Studium der Beugungserscheinungen besonders geeignetes Verfahren entwickelt: die Durchstrahlung mit konvergentem Bündel. Hier wird die Elektronenquelle punktförmig im oder sehr nahe am Kristall fokussiert. Ihr Abbild entsendet als neue Quelle einen divergenten Strahlkegel bestimmter Winkelöffnung. Infolgedessen sieht man statt der LAUE-Punkte jetzt Reflexe, deren Form und Ausdehnung von der Strahlapertur abhängen und die wie die Punkte bestimmten Beugungsordnungen entsprechen. Innerhalb solcher Reflexbereiche ist das raumfest mit dem Objekt verbundene System der Kikuchilinen stets gut ausgeprägt, vor allem auch bei Kristallen, die so dünn sind, daß sie im Parallelstrahl nur Punkte geben.

Enthält das primäre Bündel einen Ausschnitt aus dem Interferenzkegel der Ordnung $\bar{g}$, so überdeckt im Beugungsdiagramm der Primärreflex ein entsprechendes Stück der Kikuchilinie $\bar{g}$.

Im Winkelabstand

1.1

$$\theta_g = \frac{|\vec{b}_g|}{k}$$

($\vec{b}_g$ = reziproker Gittervektor zum Indextripel g ; k = Vakuumwellenzahl) ist der Beugungsreflex g mit dem zugehörigen Stück der Linie g zu finden. Auf die Linie $\bar{g}$ gestrahlte, also genau unter dem Braggwinkel einfallende Intensität erfährt die stärkste Abbeugung im Vergleich zu allen anderen im Primärbündel enthaltenen und mit einem sog. Anregungsfehler behafteten Einfallsrichtungen. So erscheint die Linie $\bar{g}$ gewöhnlich dunkel im sonst hellen Primärreflex, die Linie g dagegen aufgehellt im sonst fast dunklen Beugungsbereich g . Zuweilen ist die Linie g von parallelen Nebenreflexen begleitet. Dann ist das Streuvermögen zur Beugung g so stark, daß auch noch für Einfallsrichtungen, die geringfügig vom Braggwinkel abweichen, merkliche Intensitätsmaxima im Reflex g zustandekommen.

Das Primärbündel kann auch so auf den Kristall gerichtet sein, daß es Stücke zweier Interferenzkegel $\bar{g}$ und $\bar{h}$ zugleich erfaßt. Dann finden die Beugungen g und h simultan statt. Im Diagramm (vgl. Abb. 1) sieht man die beiden sich kreuzenden Linien $\bar{g}$ und $\bar{h}$ auf der hellen Primärseite. Für das weitere ist folgender Fall interessant: das Linienpaar $\pm g$ werde von zwei einander zugeordneten Paaren $\pm h$ und $\pm(g-h)$ gekreuzt. Der Primärstrahlkegel werde insbesondere von einer Spaltblende parallel zur Linie $\bar{g}$ begrenzt, so daß diese zwischen den Linien $\bar{h}$ und $h-g$ und auch darüber hinaus beleuchtet werden kann, ohne daß Primärseite und Beugungsreflex sich im Diagramm überschneiden. Aus der Skizze in Abb. 1 erhellt nun dies: auf die Kreuzungspunkte A und A' gestrahlte Intensität gelangt außer durch

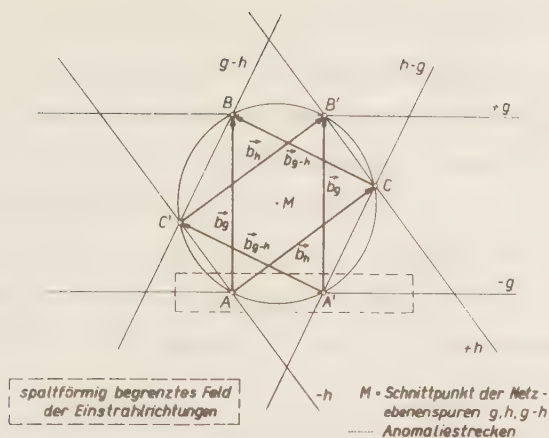


Abb. 1: durch Umweganregung gestörte Strecken auf Kikuchiliniën

unmittelbare Reflexion auch auf dem Weg über C bzw. C' nach B bzw. B'. Es ist also in den Punkten A und A' sowohl eine direkte als auch eine Umweganregung der Beugung g möglich. Das gilt in vermindertem Maße aber für die ganze Strecke $\overline{AA'}$, da dort die Anregungsfehler der "Störbeugungen" ($h, g-h$) klein sind etwa im Vergleich zu Punkten der Linie $\bar{g}$, die weit außerhalb der Strecke liegen.

Dieser Vorgang der Umweganregung ist nun Ursache einiger bemerkenswerter Effekte. Innerhalb der "Anomaliestrecke" $\overline{BB'}$ erscheint die abgebeugte Intensität bisweilen verstärkt oder geschwächt ("Intensitätsanomalie"). Ferner kann das Linienstück $\overline{BB'}$, d.h. das dort zu erwartende Intensitätsmaximum, leicht gekrümmt und aus der geometrisch definierten Lage*

*Die geometrisch definierten Schnittkurven der Interferenzkegel mit der Bildebene sollen fortan Kossellinien heißen und sind von den physikalischen, den im Bild sichtbaren Kikuchiliniën zu unterscheiden. Falls keine Störungen vorliegen, fallen Kossel- und Kikuchiliniën zusammen.

herausgerückt sein ("Lagenanomalie"). Wenn vorhanden erleiden auch die Nebenmaxima Intensitätssprünge und Lagenverschiebungen. In den Kreuzungspunkten und ihrer nächsten Umgebung ist der Einfluß der zwei Beugungen so stark, daß sich die Linien verbiegen und einander ausweichen. Dort lassen sich die Vorgänge meist nicht als Störung einer "Hauptbeugung" auffassen; sie können so vielfältig sein, daß die theoretische Behandlung zu keiner Übersichtlichen und expliziten Darstellung führt. Deshalb sollen die Kreuzungspunkte samt ihrer engeren Umgebung hier außer Betracht bleiben.

Über die Streifenstruktur haben W.KOSSEL und G.MÖLLENSTEDT^{3),4)} berichtet, I.ACKERMANN⁵⁾ und H.PFISTER⁶⁾ über Versuche an Bleijodid und dort festgestellte Intensitätsanomalien. Chr.MENZEL-KOPP⁷⁾ hat an Glimmer beobachtete Lagen- und Intensitätsanomalien ausführlich beschrieben und diskutiert. Deutungsversuche der zitierten Experimente nach der dynamischen Theorie sind u.a. von E.FUES⁸⁾, E.H.WAGNER^{8),9)} und K.KAMBE¹⁰⁾ unternommen worden. Neuerdings hat H.FENGLER¹¹⁾ die geometrische Theorie bis zur zweiten Bornschen Näherung vorangetrieben und damit u.a. die Intensitätsanomalien befriedigend erklärt.

In der vorliegenden Arbeit soll die Lagenanomalie längs des mittleren Teils der Anomaliestrecke untersucht werden. Das Programm ist sehr einfach: die Intensitätsverteilung muß im Anomaliebereich Maxima haben, die sich streifenförmig in der Nähe der Kossellinie g hinziehen. Der Verlauf dieser Maxima ist festzustellen. Für den hier betrachteten Bereich kann die Intensitätsverteilung aus der dynamischen Theorie des Zweistrahlfalls in Bethescher Näherung (Erfassung von Störbeugungen) entwickelt werden.

II. Die Intensität im Zweistrahlfall der dynamischen Theorie

Die dynamische Theorie der Elektroneninterferenzen ist in mehreren Büchern z.T. ausführlich dargestellt worden¹²⁾. Hier soll nur einiges daraus erwähnt werden, soweit es zur Ausführung des obengenannten Programms erforderlich ist.

Die Idee der dynamischen Theorie besteht in der Integration der Schrödingergleichung im dreifach periodischen Potentialfeld des nach zwei Dimensionen unendlich zu denkenden Kristallplättchens. Mittels einer Fouriertransformation gelingt es, die Differentialgleichung in ein System unendlich vieler algebraischer Gleichungen, der sog. Grundgleichungen, zu überführen. Demgemäß erscheint der Ansatz einer Lösungsfunktion nicht mehr als Fourierintegral, sondern bis auf einen vorerst unbestimmten Stärkefaktor als Summe unendlich vieler ebener Wellen mit Wellenvektoren, die sich von einem charakteristischen, dem sog. Ausbreitungsvektor, entsprechend der Periodizität des Kristallpotentials nur um reziproke Gittervektoren unterscheiden. Die Partialamplituden eines solchen Wellenfeldes sind die Unbekannten der linearen und homogenen Grundgleichungen. Ein homogenes Gleichungssystem hat nur dann nichttriviale Lösungen, wenn die Koeffizientendeterminante verschwindet. Diese Bedingung liefert alle Ausbreitungsvektoren $\vec{K}$, mit denen von Null verschiedene Lösungsfunktionen aufgebaut werden können. Zu jedem erhält man aus den Grundgleichungen einen Satz Partialamplituden, womit die Struktur des Wellenfeldes $\Psi_{\vec{K}}(\vec{r})$ bereits vollständig bestimmt ist. Der Zustand im Kristall wird durch die Überlagerung solcher Wellenfelder beschrieben.

Die im Vakuum konsistente Form der Elektronenausbreitung ist dagegen die ebene Welle. Es versteht sich, daß beide Ausbreitungsformen an den Kristallbegrenzungsflächen gewisse Stetigkeitsforderungen erfüllen müssen. Diese Grenzbedingungen verknüpfen die Amplituden aller Vakuumwellen (der einfallenden, reflektierten und austretenden) mit den Amplituden aller Wellenfelder (der in den Kristall gestrahlten und an der Rückseite reflektierten). Welche der theoretisch möglichen Wellenfelder sich im Objekt wirklich ausbreiten, ist damit entschieden. Zufolge der periodischen Struktur in den Begrenzungsflächen führt eine Fouriertransformation der Grenzbedingungen wieder auf ein algebraisches Gleichungssystem, das zur Bestimmung aller Amplituden und damit insbesondere aller austretenden Wellen ausreicht.

Unendliche lineare Gleichungssysteme sind nicht zu lösen, weswegen eine Reduktion auf endlich viele Gleichungen erforderlich ist. Ein geeignetes Auswahlkriterium läßt sich aus den Vorstellungen der geometrischen Theorie gewinnen. Dort wird als Interferenzbedingung für unendlich ausgedehnte Kristallgitter

$$2.1 \quad \vec{k}_m^2 = \vec{k}_0^2$$

verlangt, wo $\vec{k}_0$ und $\vec{k}_m = \vec{k}_0 + \vec{b}_m$ die Wellenvektoren des gebeugten ($\vec{k}_m$) bzw. ungebeugten ($\vec{k}_0$) Strahls bedeuten und $\vec{b}_m$ den reziproken Gittervektor zum Indextripel m angibt. Im Falle eines Kristallgitters endlicher Ausdehnung gibt es auch für solche $\vec{k}_0$, die von der Braggrichtung ein wenig abweichen, eine wenn auch schwächere Beugung. Ein Maß für die Abweichung ist der Abstand des Gitterpunktes m von der Ausbreitungskugel:

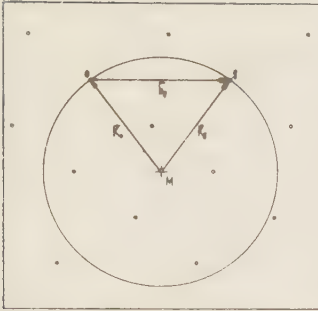


Abb.2: Ewaldsche Kugelkonstruktion für die Beugungsbedingung; "o" Punkte des reziproken Gitters

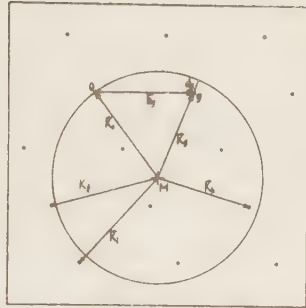


Abb.3: gemilderte Ewaldsche Konstruktion

2.2

$$d_m = |\vec{K}_0| - |\vec{K}_0 + \vec{b}_m| = |\vec{K}_0| - |\vec{K}_m|$$

Nach dieser gemilderten Ewaldschen Konstruktion ist die Beugung an der Netzebene m dann als stark zu berücksichtigen, wenn

2.3

$$d_m < S$$

gilt, wo S eine passend gewählte Schranke ist, während der Einfluß aller Indextripel mit $d > S$ als schwach zu vernachlässigen sein soll. Dem entspricht in der dynamischen Theorie die Streichung aller mit solchen Indextripeln indizierten Glieder und Gleichungen im System der Grundgleichungen. Übrig bleiben jedenfalls nur endlich viele, z.B. N Gleichungen mit ebenso vielen Partialamplituden u_m . Die Lösungsbedingung liefert eine endliche Anzahl Ausbreitungsvektoren, und es laufen höchstens N "starke" Wellenfelder durch den Kristall. Man spricht dann vom "N-Strahl-Fall".

Statt d_m erscheint in den Grundgleichungen als kritische

Größe der sog. Anregungsfehler:

$$2.4 \quad F_m = \vec{k}_o^2 - (\vec{k}_o + \vec{b}_m)^2 = -2(\vec{k}_o \vec{b}_m) - \vec{b}_m^2$$

für kleine d_m bzw. F_m gilt jedoch:

$$2.5 \quad F_m = (|\vec{k}_o| + |\vec{k}_o + \vec{b}_m|) \cdot (|\vec{k}_o| - |\vec{k}_o + \vec{b}_m|) = \\ \approx 2|\vec{k}_o| \cdot (|\vec{k}_o| - |\vec{k}_o + \vec{b}_m|) = 2|\vec{k}_o| \cdot d_m$$

Statt 2.3 ist also

$$2.6 \quad F_m < L = 2S|\vec{k}_o|$$

zu verlangen, und die Größe L bedingt die Güte der Näherung. Sie muß jedem Problem geeignet angepaßt werden.

Für die geplante Untersuchung genügt es, den Nullstrahl und den Beugungsstrahl g als "stark" anzusehen. Der Einfluß der Linien h und $g-h$ auf dieses Zweistrahlproblem wird nach einem besonderen Verfahren (siehe S.14) berücksichtigt. Die Intensitätsverteilung lautet im Falle zweier starker Strahlen und eines planparallel begrenzten Kristalls zunächst ohne Beachtung störender Beugungen:

$$2.7 \quad J_g = 4U_o^2 \frac{V_g^2 \cdot \sin^2 \frac{\pi}{2} \lambda D \sqrt{F_g^2 + 4V_g^2}}{F_g^2 + 4V_g^2} = (\pi \lambda D V_g U_o)^2 \frac{\sin^2 \frac{\pi}{2} \lambda D \sqrt{F_g^2 + 4V_g^2}}{(\frac{\pi}{2} \lambda D \sqrt{F_g^2 + 4V_g^2})^2}$$

U_o = Primäramplitude, λ = Wellenlänge, D = Plättchendicke,

$V_g = \frac{\Phi_g}{150} \text{ v}^{-1} \text{ \AA}^{-2}$, Φ_g = Strukturpotential (in Volt) der Beugung g ,

F_g = Anregungsfehler.

Zum besseren Verständnis weiter unten folgender Abschnitte sei vorerst diese Formel kurz diskutiert.

III. Diskussion des Intensitätsverlaufs quer zu den Kikuchilinien ohne Berücksichtigung störender Nebenbeugungen

Die Elektronenbündelachse steht in der Versuchsanordnung nach KOSSEL und MÖLLENSTEDT senkrecht auf der Kristalloberfläche. Ferner sind Bündelöffnung und Braggwinkel sehr klein (Größenordnung 1°). Die Gittervektoren $\vec{b}_m$ der reflektierenden Netzebenenscharen $g, h, g-h$ liegen also nahezu parallel zu den Grenzflächen des Kristallplättchens. Ist die Beobachtungsebene gleichfalls parallel zu diesem und im Abstand R von ihm aufgespannt, so können die Tangentialkomponenten der Vektoren $\vec{b}$ und $\vec{K}$ auch als Vektoren in jener Ebene aufgefaßt werden, wenn

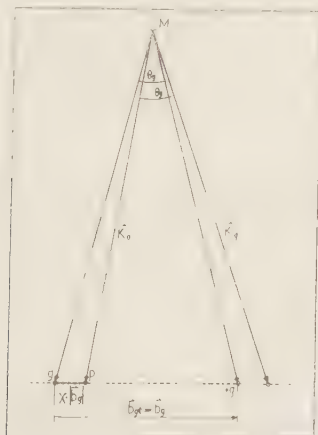


Abb.4: axialer Schnitt durch das Elektronenstrahlbündel in der Ebene der Abbeugung.
M Kristallort, gestrichelt die Schnittgerade der Beobachtungs- und der Zeichenebene, $-g$ und $+g$ Durchstoßpunkte der Kossellinien.
(Alle Längen sind mit R/K multipliziert.)

man sie mit dem Abbildungsverhältnis R/K multipliziert. Jedem Punkt P im Beugungsbild entspricht ein Wellenvektor $\vec{K}_0$, durch den nach 2.4 der Anregungsfehler F_g zur Einfallrichtung $\vec{K}_0$ bestimmt ist. Für den relativen Abstand x eines solchen Aufpunktes von der Linie $\bar{g}$ findet man:

$$3.1 \quad x = \left| \frac{1}{2} + \frac{(\vec{K}_0 \vec{b}_{gt})}{\vec{b}_{gt}^2} \right|$$

oder wegen $\vec{b}_{gt} \approx \vec{b}_g$ auch:

$$3.2 \quad x = \left| \frac{1}{2} + \frac{(\vec{K}_0 \vec{b}_g)}{\vec{b}_g^2} \right| = \frac{1}{2\vec{b}_g^2} |\vec{b}_g^2 + 2(\vec{K}_0 \vec{b}_g)| = \frac{|F_g|}{2\vec{b}_g^2} \quad (\text{nach 2.4})$$

$|F_g|$ ist also proportional zum Abstand x und F_g daher als Koordinate geeignet. Zählt man x in der Richtung des Vektors $\vec{b}_g$ positiv, so ist

$$3.3 \quad F_g = -2\vec{b}_g^2 x$$

zu schreiben.

Zur Feststellung der Intensitätsmaxima und -minima wird die Zweistrahlsformel 2.7 nach F_g differenziert:

$$3.4 \quad \frac{dJ_g}{dF_g} = 4U_0^2 V_g^2 \cdot \frac{1}{(F_g^2 + 4V_g^2)^2} \times \\ \times \left[(F_g^2 + 4V_g^2) \cdot 2\sin(\arg)\cos(\arg) \cdot \frac{r\lambda DF_g}{2\sqrt{F_g^2 + 4V_g^2}} - 2F_g \sin^2(\arg) \right]$$

$$\text{mit } \arg = \frac{r\lambda D}{2} \sqrt{F_g^2 + 4V_g^2}$$

$\frac{dJ_g}{dF_g} = 0$ gibt als Bestimmungsgleichung:

$$3.5 \quad 0 = F_g \sin(\arg) [\arg \cdot \cos(\arg) - \sin(\arg)]$$

Die Lösungen sind:

1) $F_g = 0$, 2) $\sin(\arg) = 0$ und 3) $\arg \cdot \cos(\arg) = \sin(\arg)$

oder $\frac{\tan(\arg)}{\arg} = 1$.

$\sin(\arg) = 0$ bedeutet: $\frac{1}{2}\lambda D \sqrt{F_g^2 + 4V_g^2} = n\pi$, ($n=1,2,\dots$)

$$\text{oder: } F_g = \pm 2 \sqrt{\left(\frac{n}{\lambda D}\right)^2 - V_g^2}$$

während $\frac{\tan(\arg)}{\arg} = 1$ mit $\frac{1}{2}\lambda D \sqrt{F_g^2 + 4V_g^2} \approx \frac{2n+1}{2}\pi$, ($n=1,2,\dots$)

$$F_g \approx \pm \sqrt{\left(\frac{2n+1}{\lambda D}\right)^2 - 4V_g^2}$$

erfüllt ist, und zwar um so besser, je größer n ist.

Lösung 1), $F_g=0$, entspricht der Kossellinie g ; die Intensität $J_g(0)$ kann ein absolutes, ein relatives Maximum oder ein Minimum sein. Das hängt wie ersichtlich von den Parametern λ , D und V_g ab.* Die Lösungen 2) und 3) stellen die Minima (Nullstellen) und Nebenmaxima vor. Sie liegen parallel zur Hauptlinie.

Die kleinsten in der Praxis verwendeten Werte λ und D liegen bei $\lambda=3,7 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$ ($\approx 100 \text{ kV}$) bzw. $D=100 \text{ \AA}$; $|V_g|=0,003 \text{ \AA}^{-2}$ entspricht einem schwachen Streuvermögen. Damit wird das Argument an der Stelle $F_g=0$: $\arg(0) = \frac{1}{2}\lambda D \sqrt{F_g^2 + 4V_g^2} = \pi \lambda D \cdot |V_g| \approx 0,01\pi$,

*Im Falle starker Beugung g (großes $|V_g|$) kann der störungsfreie wie auch gestörte Hauptreflex seine Intensität als Folge einer Variation der Parameter λ und D teilweise oder gänzlich an die Nebenmaxima abgeben (vgl. z.B. Abb. 5), ohne dabei seine Lage zu ändern. Visuell entsteht der Eindruck einer Aufspaltung, einer Verschiebung; gleichwohl bleibt die Symmetrie des Streifenbildes zur Kossellinie g erhalten. Eine wirkliche, d.h. geometrische Lagenanomalie am Hauptreflex zerstört in dessen die Symmetrie und ist daran leicht zu erkennen.

und die Funktion $\frac{\sin^2(\arg)}{\arg^2}$ stimmt dort wie auch für kleine F_g mit der bekannten Funktion $\frac{\sin^2 x}{x^2}$ ($x = \frac{\pi}{2} \lambda D F_g$) fast überein. Diese hat im ersten Nebenmaximum nur noch die Höhe 0,047. Extrem kleine Parameter $\lambda, D, |V_g|$ sind also der Beobachtbarkeit der Nebenlinien ungünstig. (Freilich ist das Hauptmaximum für die angegebenen Minimalwerte $\lambda, D, |V_g|$ so flach und breit, daß von einer Linie nicht die Rede sein kann. Siehe auch Abb.5)

Mit zunehmenden $\lambda, D, |V_g|$ wird das Hauptmaximum schmäler, gewinnt aber zunächst noch an Intensität, bis $\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\lambda D} = |V_g|$ ist;

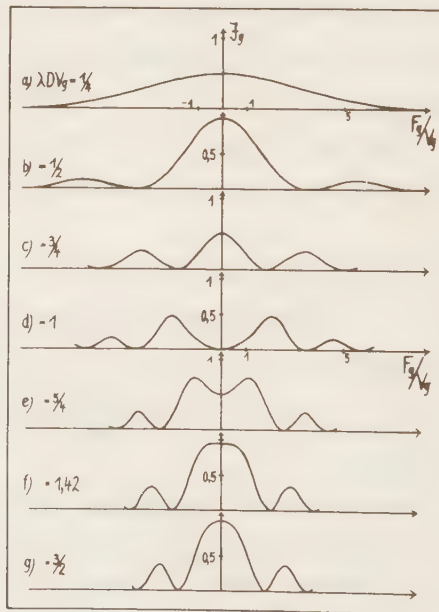


Abb.5

Intensitätsverteilung als Funktion des Anregungsfehlers F_g bei Variation der Parameter λ und D ; statt F_g ist die Zahl F_g/V_g aufgetragen

dort hat es seinen Höchstwert erreicht und nimmt nun wieder ab, während die beidseitig benachbarten Minima gemäß 2) mit $n=1$ ihm stetig näherrücken. Bei $\frac{1}{\lambda D} = |v_g|$ haben die Nullstellen das Maximum aufgezehrt und fallen zusammen. In der Tat verschwindet dort der Differentialquotient 3.4 wie F_g^3 . Nehmen die drei Parameter weiter zu, so laufen statt der nunmehr gelöschten (komplexen) Nullstellen die folgenden Nebenmaxima gemäß 3) mit $n=1$ auf die Kossellinie g zu und gewinnen dabei ständig an Intensität (in Formel 2.7 wird der Faktor $\tau \lambda D |v_g|$ größer), während sie gleichzeitig das bei $F_g=0$ entstandene Minimum anheben. Bei $\frac{3}{2} \cdot \frac{1}{\lambda D} = |v_g|$ (genauer der kleinsten Wurzel der Gleichung $\frac{\text{tg}[\arg(0)]}{\arg(0)} = 1$, d.h. $\text{tg} \lambda D |v_g| \tau = \lambda D |v_g| \tau$; $\lambda D |v_g| = 1,42$) fallen beide Maxima zusammen und tilgen das Minimum in ihrer Mitte. Wieder verschwindet der Differentialquotient wie F_g^3 . Den größten Wert erreicht das neue Hauptmaximum bei $\lambda D |v_g| = \frac{3}{2}$. Wenn das Produkt $\lambda D |v_g|$ weiter ansteigt, wiederholt sich der im Intervall $\frac{1}{2} < \lambda D |v_g| < \frac{3}{2}$ beschriebene Vorgang*, jetzt mit $n=2$; nur rücken mit wachsendem n die Extremstellen dichter zusammen, d.h. die Intensitätsfunktion reagiert auf eine relativ gleiche Veränderung der Parameter empfindlicher. Beispiel: $\lambda D |v_g| = 1 \rightarrow \sin^2 \arg(0) = 0$; $\lambda D |v_g| = 1+10\% = 1,1 \rightarrow \sin^2 \arg(0) = \sin^2(\frac{\tau}{10})$. Dagegen: $\lambda D |v_g| = 10 \rightarrow \sin^2 \arg(0) = 0$; $\lambda D |v_g| = 10+10\% = 11 \rightarrow \sin^2 \arg(0) = \sin^2 \tau = 0$!

Die hier aufgrund der Formel 2.7 gegebene Analyse berücksichtigt nur die "starke" Beugung g . Indessen werden gerade die schwachen Störbeugungen h und $g-h$ als Ursache der zu besprechenden Lagenanomalien vermutet. Wollte man alle drei

*In $0 < \lambda D |v_g| < \frac{1}{2}$ liegt anders als in den entsprechenden Intervallen $n < \lambda D |v_g| < n + \frac{1}{2}$ ($n=1,2,\dots$) bei $F_g=0$ ein Maximum. In $0 < \lambda D |v_g| < 1$ fehlt nämlich das Maximum gemäß 3).

Indextripel mathematisch gleich bewerten, müßte man zum Vierstrahlfall (0,g,h,g-h) übergehen, dessen Behandlung geschlossen nicht möglich ist. H.BETHE¹³⁾ hat den Zweistrahlfall der dynamischen Theorie in einer Form dargestellt, die neben den zwei starken Wellenfeldern noch die Einflüsse beliebig vieler schwach angeregter Beugungen erfaßt, ohne daß das Zweistrahlfeld dadurch sein spezifisches Gesicht verliert. Somit läßt sich eine Zweistrahlfeldformel entwickeln, die die Störung der Hauptbeugung g durch zwei Nebenbeugungen h und g-h beschreibt.

IV. Die Intensität im Zweistrahlfall mit Berücksichtigung störender Nebenbeugungen

Allgemein erscheint die Intensität des abgelenkten Strahls im Falle zweier starker Wellenfelder als:

$$4.1 \quad J_g = \left| u_{g+} e^{i\xi} + u_{g-} e^{-i\xi} \right|^2$$

oder wegen der Grenzbedingung $u_{g+} = -u_{g-}$ auch:

$$4.1a \quad J_g = 4u_{g+}^2 \cdot \sin^2 \xi$$

Darin bedeuten: $u_{g\pm}$ die beiden Partialamplituden, $\xi = \pi D t^{-1}$, D Plättchendicke, $t = \frac{2}{w_+ - w_-}$; $w_{\pm}$ sind die Wurzeln (Eigenwerte) der Ausbreitungsgleichung, die nach BETHE für den Zweistrahlfall mit Störungen geschrieben werden muß:

$$4.2 \quad (w + \sum_{\mathbf{w}}^1) (w - w_{g+} + \sum_{\mathbf{w}}^2) - (v_{g-} - \sum_{\mathbf{w}}^p)^2 = 0^*$$

*Die Lagenanomalien sind bisher stets an Kristallgittern mit Symmetriezentrum beobachtet worden; für diese sind alle V_m reell, so daß $V_m = V_{-m}$ gilt.

mit den Betheschen Zusatzpotentialen $\sum_w^i$:

$$\sum_w^1 = \sum_m \frac{V_m^2}{F_m - w} ; \quad \sum_w^2 = \sum_m \frac{V_m^2 g_m}{F_m - w} ; \quad \sum_w^p = \sum_m \frac{V_m \cdot V_m g_m}{F_m - w} ; \quad m=h, g-h$$

Diese Summen $\sum_w^i$ drücken den Einfluß der Beugungen h und $g-h$ aus. (Streichet man sie, so wird aus 4.2 die Ausbreitungsgleichung des einfachen Zweistrahlfalls, woraus auch Formel 2.7 berechnet ist.) Die Eigenwerte ergeben sich aus Gl.4.2 zu:

$$4.3 \quad \begin{aligned} w_+ &= \frac{1}{2}(F_g - \sum_+^s + \sqrt{(F_g - \sum_+^d)^2 + 4(V_g - \sum_+^p)^2}) \\ w_- &= \frac{1}{2}(F_g - \sum_-^s - \sqrt{(F_g - \sum_-^d)^2 + 4(V_g - \sum_-^p)^2}) , \end{aligned}$$

wo in den $\sum_{\pm}^i$ bzw. $w=w_{\pm}$ zu setzen ist und die Abkürzungen

$$4.4 \quad \sum_w^1 + \sum_w^2 = \sum_w^s \quad \text{und} \quad \sum_w^2 - \sum_w^1 = \sum_w^d$$

verwendet sind. Die Formeln 4.3 sind zunächst keine expliziten Gleichungen für die Eigenwerte $w_{\pm}$, da diese in den Zusatzpotentialen auf der rechten Seite von 4.3 stehen; dort können sie jedoch durch Werte geringerer Näherung ersetzt werden.

Es bleibt noch die Amplitude u_{g+} zu bestimmen. Aus den Grenzbedingungen im Zweistrahlfall folgt:

$$4.5 \quad u_{g+} = \frac{U_0}{\frac{u_{0+}}{u_{g+}} - \frac{u_{0-}}{u_{g-}}}$$

Die Verhältnisse $\frac{u_{0\pm}}{u_{g\pm}}$ erhält man aus einer der beiden mit den $w_{\pm}$ linear abhängigen Grundgleichungen:

$$\frac{u_{0+}}{u_{g+}} = \frac{w_+ - (F_g - \sum_+^2)}{V_g - \sum_+^p} ; \quad \frac{u_{0-}}{u_{g-}} = \frac{w_- - (F_g - \sum_-^2)}{V_g - \sum_-^p}$$

ihre Differenz wird:

$$4.6 \quad \frac{u_{0+}}{u_{g+}} - \frac{u_{0-}}{u_{g-}} = \frac{[w_+ - (F_g - \sum_+^2)](v_g - \sum_-^p) - [w_- - (F_g - \sum_-^2)](v_g - \sum_+^p)}{(v_g - \sum_+^p)(v_g - \sum_-^p)}$$

Somit lautet die Intensitätsverteilung in Bethescher Näherung:

$$4.7 \quad J_g = 4U_0^2 \frac{[(v_g - \sum_+^p)(v_g - \sum_-^p)]^2 \sin^2 \frac{\pi}{2} \lambda D (w_+ - w_-)}{\{[w_+ - (F_g - \sum_+^2)](v_g - \sum_-^p) - [w_- - (F_g - \sum_-^2)](v_g - \sum_+^p)\}^2}$$

In den Zusatzpotentialen $\sum_i$ müssen nun die Wurzeln $w_{\pm}$ der Ausbreitungsgleichung durch passende Näherungswerte ersetzt werden, die je nach der Größe des Anregungsfehlers verschieden zu wählen sind. Für $|F_g| > |V_g|$ kann, wie aus 4.3 zu ersehen, recht gut $w_+ = F_g$ und $w_- = 0$ oder umgekehrt (je nach dem Vorzeichen des Anregungsfehlers) geschrieben werden. Im Falle $0 \leq |F_g| \leq |V_g|$ ist eine solche Näherung nicht zweckmäßig; die Fehlerbeträge bleiben zwar zu vernachlässigen, doch wird die funktionale Abhängigkeit der Eigenwerte vom Anregungsfehler derart verfälscht, daß die Bildung eines Differentialquotienten nach F_g sinnlos wäre. Dieser Umstand erfordert eine getrennte Behandlung der beiden Bereiche $|F_g| > |V_g|$ und $0 \leq |F_g| \leq |V_g|$. In den letztgenannten fällt vermutlich das Hauptmaximum*, während die zuweilen begleitenden Nebestreifen im allgemeinen bei $|F_g| > |V_g|$ liegen. (Höchstens die dem Hauptmaximum nächsten benachbarten Linien könnten sehr dicht neben diesem gelegen sein. Andererseits ist V_g nicht als scharfe Grenze zwischen beiden Bereichen aufzufassen.) Wir wenden uns vorderhand dem Hauptreflex zu.

*Begriffe wie "Hauptmaximum", "Hauptreflex" u.ä. sind lediglich als Synonyme für "Kikuchilinie" im Falle begleitender Nebestreifen zu verstehen. Diese "eigentliche" Kikuchilinie kann durchaus ein Intensitätsminimum zeigen (vgl. S.13 u. Abb.5).

V. Die Hauptlinie

Damit die folgenden Rechnungen leichter zu übersehen sind, sollen eingangs einige Abkürzungen eingeführt werden:

$$5.1 \quad \begin{aligned} V_g - \sum_{\pm}^p &= A_{\pm} \\ F_g - \sum_{\pm}^d &= B_{\pm} \end{aligned}$$

ferner ist mit 4.3,4

$$5.2 \quad w_{\pm} - (F_g - \sum_{\pm}^2) = \frac{1}{2}(-B_{\pm} \pm \sqrt{B_{\pm}^2 + 4A_{\pm}^2})$$

Die Intensitätsformel 4.7 lautet jetzt:

$$5.3 \quad J_g = 16U_0^2 \cdot \frac{(A_+ \cdot A_-)^2 \sin^2 \frac{1}{4} \lambda D (\sum_{\pm}^s - \sum_{\pm}^z + \sqrt{B_+^2 + 4A_+^2} + \sqrt{B_-^2 + 4A_-^2})}{\{(-B_+ + \sqrt{B_+^2 + 4A_+^2})A_- - (-B_- - \sqrt{B_-^2 + 4A_-^2})A_+\}^2}$$

Wir wollen nun einen Sonderfall untersuchen: die störenden Linien h und g-h liegen symmetrisch zur Netzebenen-*g*; es ist $|\vec{b}_h| = |\vec{b}_{g-h}|$ und auch $V_h = V_{g-h}$, womit wegen

$$5.4a \quad \sum_{\pm}^d = (v_h^2 - v_{g-h}^2) \left(\frac{1}{F_{g-h} - w_{\pm}} - \frac{1}{F_h - w_{\pm}} \right) \equiv 0$$

der Übergang $B_{\pm} \rightarrow F_g$ verbunden ist.

Wie sich sogleich zeigen wird, ist es unter dieser Voraussetzung zweckmäßig, in den $\sum^i$ nicht, wie im vorigen Abschnitt verlangt, eine Näherung für die Eigenwerte $w_{\pm}$ einzuführen, sondern diese selbst beizubehalten. Gleichung 5.3 hat die Form:

$$5.3a \quad J_g \sim \frac{f^2(F_g) \cdot \varphi^2(F_g)}{N^2(F_g)} \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} f &= A_+ \cdot A_- \\ \varphi &= \sin(\arg) \\ N &= \text{Nenner} \end{aligned}$$

wo die Abkürzung "arg" für das Argument des Sinus in 5.3 steht. Statt der Intensität kann man auch die Amplitude U_g ($J_g = |U_g|^2$) nach F_g differenzieren und den Quotienten $\frac{\partial U_g}{\partial F_g}$ gleich Null setzen:

$$5.5 \quad \frac{\partial U_g}{\partial F_g} = U'_g = 0 = \frac{f'}{f} + \frac{\phi'}{\phi} - \frac{N'}{N}$$

Wir erwarten das Hauptmaximum wie gesagt bei $F_g=0$ oder dicht daneben, jedenfalls im Bereich $0 \leq |F_g| \leq |V_g|$. Deshalb berechnen wir nun die Funktionen f' , ϕ' und N' und setzen darin F_g gleich Null.

$$a) \quad f' = A'_+ \cdot A_- + A'_- \cdot A_+$$

Mit den Betheschen Zusatzpotentialen

$$5.4b \quad \sum_{\pm}^p = V_h \cdot V_{g-h} \left(\frac{1}{F_h - w_{\pm}} + \frac{1}{F_{g-h} - w_{\pm}} \right)$$

$$5.4c \quad \sum_{\pm}^s = (V_h^2 + V_{g-h}^2) \left(\frac{1}{F_h - w_{\pm}} + \frac{1}{F_{g-h} - w_{\pm}} \right)$$

ist

$$5.6 \quad \frac{\partial A_{\pm}}{\partial F_g} = A'_{\pm} = \frac{\partial}{\partial F_g} \sum_m \frac{V_m \cdot V_{g-m}}{F_m - F_{g/2} - \frac{1}{2}(-\sum_{\pm}^s \pm \sqrt{F_g^2 + 4A_{\pm}^2})} ; m=h, g-h$$

Später wird gezeigt werden, daß im Falle $|\vec{b}_h| = |\vec{b}_{g-h}|$ der Ausdruck $F_m - \frac{1}{2}F_g$ nicht mehr von F_g abhängt. Infolgedessen erhalten wir:

$$5.7 \quad A'_{\pm} = \sum_m V_m \cdot V_{g-m} \cdot \frac{-\sum_{\pm}^s \pm \frac{F_g + 4A_{\pm}^2}{\sqrt{F_g^2 + 4A_{\pm}^2}}}{2(F_m - w_{\pm})^2}$$

Daraus folgt aber wegen $A'_{\pm} \equiv \sum_{\pm}^p, \sum_{\pm}^p$ proportional $\sum_{\pm}^s$ sofort:

$$5.8 \quad A'_{\pm}(F_g=0) = \sum_{\pm}^s(F_g=0) = 0 \quad \text{und damit auch} \quad f'(0) = 0$$

$$b) \quad \varphi' = \cos(\arg) \cdot \arg'$$

$$\begin{aligned} \arg' &= \frac{\pi}{4} \lambda D (\sum_-^s - \sum_+^s + \sqrt{F_g^2 + 4A_+^2} + \sqrt{F_g^2 + 4A_-^2})' \\ 5.9 \quad &= \frac{\pi}{4} \lambda D (\sum_-^s - \sum_+^s + \frac{F_g + 4A_+ + A_+'}{\sqrt{F_g^2 + 4A_+^2}} + \frac{F_g + 4A_- - A_-'}{\sqrt{F_g^2 + 4A_-^2}}) \end{aligned}$$

wegen 5.8 ist wieder

$$5.10 \quad \varphi'(F_g=0) = 0$$

$$\begin{aligned} c) \quad N' &= [(-F_g + \sqrt{F_g^2 + 4A_+^2})A_- - (-F_g - \sqrt{F_g^2 + 4A_-^2})A_+]', \\ 5.11 \quad &= (-F_g + \sqrt{F_g^2 + 4A_+^2})A_-' + (-1 + \frac{F_g + 4A_+ + A_+'}{\sqrt{F_g^2 + 4A_+^2}})A_- - \\ &- (-F_g - \sqrt{F_g^2 + 4A_-^2})A_+' - (-1 - \frac{F_g + 4A_- - A_-'}{\sqrt{F_g^2 + 4A_-^2}})A_+ \end{aligned}$$

Der erste und dritte Term verschwinden wegen 5.8 an der Stelle $F_g=0$. Vom zweiten und vierten verbleibt dort $A_+ - A_-$, also

$$5.12 \quad N'(0) = A_+ - A_- = \sum_m V_m \cdot V_{g-m} (\frac{1}{F_m - w_-} - \frac{1}{F_m - w_+})$$

$N'(0)$ kann nicht verschwinden, da die Eigenwerte bei $F_g=0$ nicht übereinstimmen. Doch unterscheiden sich diese nur geringfügig (Größenordnung $|V_g|$) voneinander, und so muß die Differenz $A_+ - A_-$ sehr klein sein. Gewöhnlich werden die Eigenwerte in den Betheschen Zusatzpotentialen für $|F_g| \ll |V_g|$ überhaupt unterdrückt, da die resultierenden Fehler die Genauigkeit der Theorie nicht beeinträchtigen. Wir haben dies bisher aus rechnerischen Gründen vermieden*, können es jetzt jedoch nachholen und damit im Rahmen der Betheschen Näherung dem Hauptmaximum

*Die Streichung der Eigenwerte in 5.6 ist wegen der folgenden Differentiation möglicherweise unzulässig.

die Lage $F_g=0$ (Kossellinie) zuschreiben.

Im allgemeinen ist $V_h \neq V_{g-h}$, und in Gl.5.3 stehen anstelle von F_g die Transformatierten $B_{\pm} = F_g - \sum_{\pm}^d = F_g - (V_h^2 - V_{g-h}^2) \times (\frac{1}{F_{g-h-w_{\pm}}} - \frac{1}{F_{h-w_{\pm}}})$. Wo $F_h \approx F_{g-h}$ ist, bleiben die Zusatzglieder $\sum_{\pm}^d$ verschwindend klein. Selbst im Falle $|F_{m-w_{\pm}}| \approx |V_n|$ haben ihre Beträge nur etwa den Wert $|V_n|$, wenn man unter $|V_n|$ das größere der beiden Potentiale versteht. Die Gleichungen $B_{\pm}=0$ sind also stets mit $|F_g| \leq |V_n|$ erfüllt, solange $|F_{m-w_{\pm}}| \geq |V_n|$. Sie beschreiben von der Kossellinie $F_g=0$ nur geringfügig abweichende Kurven.

Untersucht man nun den Differentialquotienten 5.5 längs der Kurve $B=0^*$ statt bei $F_g=0$, so werden die Funktionen f' und ϕ' im allgemeinen dort nicht verschwinden. Doch bleiben sie wie auch N' und damit $\frac{\partial U_g}{\partial F_g}$ wegen $|F_g| \leq |V_n|$ längs $B=0$ sicher sehr klein. Dies legt die Vermutung nahe, daß der Differentialquotient "dicht neben" $B=0$ verschwindet. Bestimmend für die analytische Form der Intensitätsverteilung ist nämlich die Funktion $\phi = \sin(\arg)$; daneben beschreibt $\frac{f}{N}$ eine Dämpfung, die naturgemäß längs $F_g=0$ bzw. $B=0$ oder in unmittelbarer Nähe minimal sein und beidseitig für wachsende $|F_g|$ bzw. $|B|$ monoton zunehmen muß. Sie ist jedenfalls in einem gewissen Bereich $\pm \Delta B$ um $B=0$ nur schwach veränderlich und beeinflusst dort den Charakter der Funktion ϕ nur unwesentlich. Für diese allein kann aber geschlossen werden, daß ihr Differentialquotient "dicht neben" $B=0$ verschwindet, wenn er bei $B=0$ sehr klein ist. Da genauere Untersuchungen mit erheblichem rechnerischem

*Wir verzichten jetzt wieder auf die Unterscheidung der Eigenwerte und setzen diese einstweilen gleich Null.

Aufwand verbunden sind und zudem wenig lohnende Ergebnisse versprechen, wollen wir im allgemeinen Fall $V_h \neq V_{g-h}$ dem Hauptmaximum die Lage $B \approx 0$ zuschreiben. Dieser Schluß entspricht lediglich einer wohlbegründeten Vermutung; auch ist über die Größe der Abweichung des Maximums von der Kurve $B=0$ vorerst nichts gesagt. In der Praxis ist der unsymmetrische Fall $V_h \neq V_{g-h}$ sehr selten gut ausgeprägt; ein Beispiel sowie ergänzende Betrachtungen zur Theorie bringt Kap.XI.

VI. Die Nebenlinien

Es wurde bereits erwähnt, daß sich im Bereich $|F_g| > |V_g|$, wo die Nebenmaxima und -minima zu erwarten sind, gute Näherungswerte für die beiden Wurzeln $w_{\pm}$ in den Zusatzpotentialen der Ausbreitungsgleichung angeben lassen. Im einzelnen entnimmt man Gl.4.3, wenn man dort V_g und alle Summen gegen F_g vernachlässigt, folgende Zuordnung:

$$\begin{array}{ll} w_+ \approx F_g & \text{falls } F_g > 0 \\ w_- \approx 0 & \\ 6.1 & \\ w_+ \approx 0 & \text{falls } F_g < 0 \\ w_- \approx F_g & \end{array}$$

wofür man zusammenfassend auch schreiben kann:

$$6.2 \quad w_{\pm} = \frac{1}{2}(F_g \pm |F_g|)$$

Dies ist in die Summen der Ausgangsgleichung 4.7 einzuführen; wir notieren Gl.4.7 noch einmal:

$$4.7 \quad J_g = 4U_0^2 \cdot \frac{[v_g - \sum_+^p] (v_g - \sum_-^p)]^2 \sin^2 \frac{1}{2} \lambda D (w_+ - w_-)}{\left\{ [w_+ - (F_g - \sum_+^s)] (v_g - \sum_-^p) - [w_- - (F_g - \sum_-^s)] (v_g - \sum_+^p) \right\}^2}$$

mit

$$4.3 \quad w_+ = \frac{1}{2} (F_g - \sum_+^s + \sqrt{(F_g - \sum_+^s)^2 + 4(v_g - \sum_+^p)^2})$$

$$w_- = \frac{1}{2} (F_g - \sum_-^s - \sqrt{(F_g - \sum_-^s)^2 + 4(v_g - \sum_-^p)^2})$$

Der Ausdruck 4.7 für die Intensitätsverteilung ist sehr kompliziert und einer weiteren Behandlung nur schwer zugänglich (man bedenke, daß F_g , F_h und F_{g-h} von den zwei Koordinaten eines Aufpunktes in der Diagrammebene abhängen); deshalb ist eine Vereinfachung nötig. Wir definieren:

$$6.3 \quad \frac{1}{2} (\sum_+^s + \sum_-^s) = \sum^s \quad \text{und} \quad \frac{1}{2} (\sum_+^p - \sum_-^p) = z_1$$

und zeigen später, daß die $\sum^s$ und z_1 in guter Näherung einfach dargestellt werden können. Damit gehen die Eigenwerte 4.3 über in:

$$6.4 \quad w_+ = \frac{1}{2} \left[F_g - (\sum^s + z_s) + \sqrt{[F_g - (\sum^s + z_d)]^2 + 4 [v_g - (\sum^p + z_p)]^2} \right]$$

$$w_- = \frac{1}{2} \left[F_g - (\sum^s - z_s) - \sqrt{[F_g - (\sum^s - z_d)]^2 + 4 [v_g - (\sum^p - z_p)]^2} \right]$$

und ihre Differenz lautet:

$$6.5 \quad w_+ - w_- = \frac{1}{2} \left[-2z_s + H(+z_p, +z_d) + H(-z_p, -z_d) \right]$$

worin H die beiden Wurzelausdrücke in 6.4 vertritt. Der Sinn der Definition 6.3 besteht darin, die Summe der Wurzeln durch einen Mittelwert zu ersetzen. Es ist nämlich

$$6.6 \quad \underline{H} = \frac{1}{2} [H(+z_p, +z_d) + H(-z_p, -z_d)]$$

eine Funktion, deren Reihenentwicklung nach z_p und z_d nur

ge aus Potenzen in z_p und z_d enthält. Da die z_i obendrein als klein von zweiter Ordnung anzusehen sind, können sie in $\underline{H}$ vernachlässigt werden. Also:

$$\begin{aligned} 6.7 \quad w_+ - w_- &= -z_s + \underline{H}(0,0) \\ &= -z_s + \sqrt{(F_g - \sum p)^2 + 4(V_g - \sum p)^2} \end{aligned}$$

Setzt man die Definition 6.3 auch in die Differenz der Partialamplitudenverhältnisse ein und vernachlässigt alle in z oder $\sum$ quadratischen Glieder (was die Güte der Betheschen Näherung nicht gefährdet), so erhält man:

$$\begin{aligned} 6.8 \quad \frac{u_{0+}}{u_{g+}} - \frac{u_{0-}}{u_{g-}} &\approx \frac{(w_+ - w_-)(V_g - \sum p) - z_p F_g + (z_s + z_d)V_g}{(V_g - \sum p)^2} \approx \\ &\approx \frac{(w_+ - w_-) - z_p F_g V_g^{-1} + (z_s + z_d)}{V_g - \sum p} \end{aligned}$$

Mit 4.5 und 6.8 kann die Amplitude u_{g+} gebildet werden:

$$\begin{aligned} 6.9 \quad u_{g+} &\approx U_0 \cdot \frac{V_g - \sum p}{(w_+ - w_-) - z_p F_g V_g^{-1} + (z_s + z_d)} ; \\ u_{g+}^2 &\approx U_0^2 \frac{(V_g - \sum p)^2}{(w_+ - w_-)^2 + 2(w_+ - w_-)(z_s + z_d - z_p F_g V_g^{-1})} = U_0^2 \frac{(V_g - \sum p)^2}{(w_+ - w_-)^2 + \Delta} \end{aligned}$$

und die Intensitätsformel 4.7 lautet in der für die kommende Auswertung optimal erscheinenden Form:

$$6.10 \quad J_g = 4U_0^2 \cdot \frac{(V_g - \sum p)^2 \sin^2 \frac{\pi}{2} \lambda D (-z_s + \sqrt{(F_g - \sum p)^2 + 4(V_g - \sum p)^2})}{(-z_s + \sqrt{(F_g - \sum p)^2 + 4(V_g - \sum p)^2})^2 + \Delta}$$

Darin ist noch das Aussehen der Summen $\sum^*$ und des Gliedes z_s ungewiß. (Für die in Δ enthaltenen Größen z_p und z_d wird einstweilen keine analytische Darstellung gebraucht.) In den Eigenwerten nach 4.3 unterscheiden sich entsprechende Summenglieder durch ihre Nenner: $\frac{1}{F_m}$ bzw. $\frac{1}{F_m - F_g}$. Im Falle $F_m = 0$ bzw. $F_m = F_g$ verschwinden diese, und die $\sum^*$ werden singulär. Die Bethesche Störungsnaherung kann aber nur dort Anwendung finden, wo die Summen wirklich Zusatzglieder im Sinne einer Naherung und demgemäß hinreichend klein sind (z.B. gegen $|v_g|$). Das Bethesche Verfahren ist deshalb nur dann brauchbar, wenn $|F_m|$ "nicht zu klein" und "hinreichend groß" gegen $|F_g|$ ist*. In diesem Fall kann man mit 6.2 recht gut

$$\frac{1}{2} \left(\frac{1}{F_m - w_+} + \frac{1}{F_m - w_-} \right) = \frac{1}{F_m - F_g/2}$$

und

$$\frac{1}{2} \left(\frac{1}{F_m - w_+} - \frac{1}{F_m - w_-} \right) = \frac{|F_g/2|}{(F_m - F_g/2)^2}$$

setzen. Mithin haben die Zusatzglieder nach Gl.4.2,3; 6.2,3 folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} \sum^p &= v_h v_{g-h} \left(\frac{1}{F_h - \frac{1}{2}F_g} + \frac{1}{F_{g-h} - \frac{1}{2}F_g} \right) \\ 6.11 \quad \sum^d &= (v_{g-h}^2 - v_h^2) \left(\frac{1}{F_h - \frac{1}{2}F_g} - \frac{1}{F_{g-h} - \frac{1}{2}F_g} \right) \\ z_s &= \frac{1}{2} |F_g| (v_h^2 + v_{g-h}^2) \left(\frac{1}{(F_h - \frac{1}{2}F_g)^2} + \frac{1}{(F_{g-h} - \frac{1}{2}F_g)^2} \right) \end{aligned}$$

*Eigentlich genügt die mildere Voraussetzung: $|F_m|$ und $|F_m - F_g|$ "nicht zu klein". Siehe S.42

Wir führen noch die Abkürzungen

$$\begin{aligned} V_g - \sum p &= A, & F_g - \sum d &= B; \\ -z_g + \sqrt{B^2 + 4A^2} &= W, & \frac{\tau}{2} \lambda DW &= \arg \end{aligned}$$

ein und verfahren nunmehr mit Gl. 6.10 wie mit der einfachen Formel 2.7: als Ergebnis sind Abweichungen der Intensität und der Streifenlagen gegenüber dem ungestörten Zweistrahlfall zu erwarten.

$$6.13 \quad \frac{dJ}{dF_g} = 0 = A \sin(\arg) \left\{ 2(W^2 + \Delta) [A' \sin(\arg) + A \cos(\arg) \cdot \frac{\tau}{2} \lambda DW] - (2WW' + \Delta') A \cdot \sin(\arg) \right\}$$

Aus $\sin(\arg) = 0$ folgen die Minima, während der Inhalt der geschweiften Klammer die Nebenmaxima ergeben muß (und das Hauptmaximum, das wir hier außer Betracht lassen). Nach einigen Umrechnungen erhält man

$$6.14 \quad \frac{tg(\arg)}{\arg} = \frac{2(W^2 + \Delta)AW'}{[(2WW' + \Delta') \cdot A - 2(W^2 + \Delta)A] W} = Q$$

in formaler Analogie zum ungestörten Fall, wo $Q \equiv 1$ war. Hier hängt Q in komplizierter Weise von der Einstrahlrichtung ab.

Da die Bethesche Näherung den Einfluß nur schwach angeregter Beugungen auf eine starke beschreibt, können wir jedoch annehmen, daß Q nicht wesentlich von eins abweicht (wenn nämlich

$|F_g| > |V_g|$, was in diesem Abschnitt ausdrücklich vorausgesetzt ist; bei $F_g = 0$ sind W' und A' Null oder sehr klein. Siehe S. 18

und 19.) und daß die Nebenmaxima wie im einfachen Zweistrahlfall bei $\arg \approx \frac{2n+1}{2} \pi$ liegen. Hat nun Q die Größenordnung eins,

so hängt das Argument nur geringfügig von Q ab. Das zeigt folgendes Beispiel: die drei Gleichungen

$$\frac{\operatorname{tg}(a_1)}{a_1} = \frac{1}{2}, \quad \frac{\operatorname{tg}(a_2)}{a_2} = 1 \quad \text{und} \quad \frac{\operatorname{tg}(a_3)}{a_3} = 2$$

haben in $\pi < a_v < \frac{3}{2}\pi$ je eine Lösung, und zwar: $a_1 \approx 4,27$; $a_2 \approx 4,49$; $a_3 \approx 4,60$. Der Unterschied zwischen a_1 und a_3 beträgt nur etwa 7%. Wir können demnach die Funktion Q in weiten Grenzen ändern, ohne die Lösungen der Gl.6.14 wesentlich zu verfälschen. Zunächst unterdrücken wir die kleinen Zusatzglieder Δ und Δ' und erhalten:

$$6.15 \quad \frac{\operatorname{tg}(\arg)}{\arg} = \frac{AW'}{AW' - A'W} = \frac{1}{1 - \frac{A'W}{AW'}} \quad (AW' \neq 0, \text{ wenn } |F_g| > |V_g|)$$

Die Funktion A enthält laut Gl.6.11 die Summanden $\frac{1}{F_m - F_g/2}$. Wir hatten schon darauf hingewiesen und werden demnächst zeigen, daß diese Glieder im Falle $V_h = V_{g-h}$ nicht von F_g abhängen, daß dann also (wegen 6.11) $A' \equiv 0$ ist. Die Unsymmetrie $V_h \neq V_{g-h}$ vermag aber die Streifenstruktur nicht grundlegend zu verändern, sofern man den störenden Linien nicht zu nahe kommt. Da zudem A das konstante Hauptglied V_g enthält, können wir annehmen, daß

$$6.16 \quad |A'W| \ll |AW'|$$

ist, d.h. daß sich die Lage der Nebenmaxima genügend genau aus der Gleichung

$$6.17 \quad \frac{\operatorname{tg}(\arg)}{\arg} = 1$$

bestimmen läßt.

Wir wollen nun die Lösungen $\sin(\arg)=0$ und $\frac{\operatorname{tg}(\arg)}{\arg} = 1$ für die folgende Koordinatendarstellung etwas umschreiben.

1) $\sin(\arg)=0$ ist mit $\arg=m\pi$ erfüllt, also

$$6.18 \quad \frac{1}{2} \lambda D (-z_s + \sqrt{B^2 + 4A^2}) = m\pi \quad (m=1, 2, 3, \dots)$$

$$6.19 \quad B = \pm \sqrt{\left(\frac{2m}{\lambda D} + z_s\right)^2 - 4A^2}; \quad F_g = \pm \sqrt{\left(\frac{2m}{\lambda D} + z_s\right)^2 - 4A^2} + \sum d$$

2) $\frac{\operatorname{tg}(\arg)}{\arg} = 1$; man entwickelt $\operatorname{tg}(\arg) = \operatorname{ctg}(\frac{\pi}{2} - \arg) =$
 $= \operatorname{ctg}(\frac{2m+1}{2}\pi - \arg)$ bei $\frac{2m+1}{2}\pi$ ($m=1, 2, \dots$) in die bekannte Reihe
 und bricht nach dem quadratischen Glied ab. Das führt auf die
 Gleichung

$$\frac{2}{3} \left(\frac{2m+1}{2}\pi - \arg\right)^2 - \frac{2m+1}{2}\pi \left(\frac{2m+1}{2}\pi - \arg\right) + 1 = 0,$$

Woraus

$$6.20 \quad \frac{2m+1}{2}\pi - \arg = \frac{3}{4} \cdot \frac{2m+1}{2}\pi - \sqrt{\left(\frac{3}{4} \cdot \frac{2m+1}{2}\pi\right)^2 - \frac{3}{2}}$$

folgt. (Die positive Wurzel würde aus dem Konvergenzbereich
 $\left|\frac{2m+1}{2}\pi - \arg\right| < \pi$ herausführen.) Somit wird:

$$\arg = \frac{2m+1}{8}\pi + \sqrt{\left[\frac{3}{8}(2m+1)\pi\right]^2 - \frac{3}{2}} = l_m$$

$$6.21 \quad B = \pm \sqrt{\left(\frac{2l_m}{\pi \lambda D} + z_s\right)^2 - 4A^2}; \quad F_g = \pm \sqrt{\left(\frac{2l_m}{\pi \lambda D} + z_s\right)^2 - 4A^2} + \sum d$$

Die Formeln 6.19 und 6.21 können wir folgendermaßen zusammen-
 fassen:

$$6.22 \quad B = \pm \sqrt{(j_m + z_s)^2 - 4A^2}; \quad F_g = \pm \sqrt{(j_m + z_s)^2 - 4A^2} + \sum d$$

mit $j_m = \frac{2m}{\lambda D}$ für die Minima und

$j_m = \frac{2l_m}{\pi \lambda D}$ für die Maxima

Um diese Ergebnisse besser übersehen und diskutieren zu kön-
 nen, führen wir nun für alle Ortsfunktionen in der Diagramm-
 ebene gemeinsame Koordinaten ein.

VII. Koordinatendarstellung

Die Intensität der von der Einfallrichtung abgelenkten Sekundärstrahlung ist in der einfachen Zweistrahlformel 2.7 allein vom Anregungsfehler F_g bestimmt. Es versteht sich, daß auch die durch die Linien h und $g-h$ verursachten Störungen, also die Betheschen Zusatzpotentiale in Gl.6.10, von der Richtung des Nullstrahls abhängen, und zwar über die Anregungsfehler F_h und F_{g-h} . Die verbesserte Intensitätsformel 6.10 enthält nunmehr drei mit der Einfallrichtung veränderliche Größen F_g, F_h und F_{g-h} , die als Funktionen der Ortskoordinaten in der Ebene des Beugungsdiagramms darzustellen sind. Wählt man ein rechtwinkliges System derart, daß eine Achse (x) normal zur Kossellinie $\bar{g}$ liegt und diese im Mittelpunkt der Anomaliestrecke schneidet, während die zweite (y) mit der Linie $\bar{g}$ zusammenfällt und mit der ersten ein Rechtssystem bildet (siehe Abb.6), so erhält man wegen $\vec{b}_g = \vec{b}_h + \vec{b}_{g-h}$ und $F_g = -\vec{b}_g^2 x$ (p.Def.) für F_h und F_{g-h} :

$$\begin{aligned} 7.1 \quad F_h &= -(\vec{b}_g \vec{b}_h) x + \epsilon_0 \epsilon_1 (\vec{b}_h \vec{b}_{g-h}) y + (\vec{b}_h \vec{b}_{g-h}) \\ F_{g-h} &= -(\vec{b}_g \vec{b}_{g-h}) x + \epsilon_0 \epsilon_2 (\vec{b}_h \vec{b}_{g-h}) y + (\vec{b}_h \vec{b}_{g-h}) \end{aligned}$$

Darin bedeuten: $\vec{b}_m$ Vektoren des reziproken Gitters, $\epsilon_0 = \text{sign} \cos(\vec{b}_h, \vec{b}_{g-h})$, $\epsilon_1 = \text{sign} \sin(\vec{b}_h, \vec{b}_g)$, $\epsilon_2 = \text{sign} \sin[\vec{b}_{g-h}, \vec{b}_g]$. (Die Winkel $\vec{b}_h, \vec{b}_g$ und $\vec{b}_{g-h}, \vec{b}_g$ sollen von $\vec{b}_h$ bzw. $\vec{b}_{g-h}$ nach $\vec{b}_g$ gezählt werden, und zwar im Uhrzeigersinn negativ.) Ferner entspricht die Einheit auf der x -Achse dem halben Abstand der Kossellinien $\pm g$ voneinander, die Einheit auf der y -Achse der halben Länge der Anomaliestrecke. Das Verhältnis des Linien-

$$\sum_{\pm}^* P_{\pm}^* = v_h v_{g-h} \left(\frac{1}{\mathbb{P}_{g-h} - w_{\pm}} + \frac{1}{\mathbb{P}_h - w_{\pm}} \right) = \frac{4s}{\vec{b}_g^2} \cdot v_h v_{g-h} \cdot u^{\pm}(x, y)$$

$$\text{mit } u^{\pm}(x, y) = u^{\pm}(-x, -y) = \frac{1 \mp s |x|}{(1 \mp s |x|)^2 - (s, s, y + tx)^2}$$

$$7.2 \quad \sum_{\pm}^* d_{\pm}^* = (v_h^2 - v_{g-h}^2) \left(\frac{1}{\mathbb{P}_{g-h} - w_{\pm}} - \frac{1}{\mathbb{P}_h - w_{\pm}} \right) = \frac{4s}{\vec{b}_g^2} (v_h^2 - v_{g-h}^2) \cdot v^{\pm}(x, y)$$

$$\text{mit } v^{\pm}(x, y) = -v^{\pm}(-x, -y) = \frac{s, s, y + tx}{(1 \mp s |x|)^2 - (s, s, y + tx)^2}$$

$$s = \frac{\vec{b}_g^2}{2(\vec{b}_{g-h} \vec{b}_h)} ; \quad t = \frac{\vec{b}_{g-h}^2 - \vec{b}_h^2}{2(\vec{b}_{g-h} \vec{b}_h)}$$

Mit diesen Funktionen wird das Argument des Sinus in der exakten Intensitätsformel 4.7 symmetrisch zum Ursprung. Dem Nenner in 4.7 fehlt diese Eigenschaft; doch kann die Abweichung von der strengen Nullpunktsymmetrie nur gering sein, da sie nach Gl.6.10 durch das neben $\arg^2$ kleine Zusatzglied Δ verursacht wird. Demnach müssen Intensitätsverteilung und Streifenverlauf nahezu inversionssymmetrisch sein, und die Bethesche Näherung, deren Geltungsbereich später durch Maximalwerte der Funktionen $u^{\pm}$ und $v^{\pm}$ definiert wird, ist im Punkt (x, y) nur anwendbar, wenn sie auch in $(-x, -y)$ gilt.

Statt der Funktionen $u^{\pm}$ und $v^{\pm}$ werden im Rechengang entsprechende für $\sum^P, \sum^d$ und z_s (vgl.6.11) gebraucht:

*Vgl.5.4a, b

$$\sum^P = v_h v_{g-h} \left(\frac{1}{F_{g-h} - \frac{1}{2} F_g} + \frac{1}{F_h - \frac{1}{2} F_g} \right) = r \cdot v_h v_{g-h} \frac{1}{1 - \epsilon^2}$$

$$\sum^d = (v_h^2 - v_{g-h}^2) \left(\frac{1}{F_{g-h} - \frac{1}{2} F_g} - \frac{1}{F_h - \frac{1}{2} F_g} \right) = r (v_h^2 - v_{g-h}^2) \frac{\epsilon}{1 - \epsilon^2}$$

7.3

$$z_s = \frac{1}{2} |F_g| (v_h^2 + v_{g-h}^2) \frac{1}{(F_{g-h} - \frac{1}{2} F_g)^2} + \frac{1}{(F_h - \frac{1}{2} F_g)^2} =$$

$$= q (v_h^2 + v_{g-h}^2) \frac{(1 + \epsilon^2) |x|}{(1 - \epsilon^2)^2}$$

$$\text{mit } r = \frac{2}{(\vec{b}_h \vec{b}_{g-h})} ; \quad q = \frac{\vec{b}_g^2}{(\vec{b}_h \vec{b}_{g-h})^2} ; \quad \epsilon = \vec{v}_g \cdot \vec{v}_h + tx$$

Ein Nachteil dieser Funktionen ist, daß sie nicht wie $u^\pm$ und $v^\pm$ die Eigenschaft einer "Sperrre" gegen Überschreitung des Gültigkeitsbereiches der Betheschen Näherung in x -Richtung besitzen. Solcherart wirkt nämlich das Glied $s|x|$ in 7.2, das in 7.3 "herausgemittelt" ist. Im Falle $t=0$ (er entspricht den meisten Beobachtungen) wird $\sum^P$ überhaupt unabhängig von x . Daher wird man zur Prüfung auf Anwendbarkeit weiterhin die Funktionen $u^\pm$ und $v^\pm$ heranziehen müssen.

Wir setzen nun $\sum^P, \sum^d$ und z_s in die Lösungen 6.22 ein und erhalten für die Lagen der Nebenreflexe:

$$x = \pm \frac{1}{\vec{b}_g^2} \sqrt{\left(j_m + q (v_h^2 + v_{g-h}^2) \frac{(1 + \epsilon^2) |x|}{(1 - \epsilon^2)^2} \right)^2 - 4 \left(v_g - v_h v_{g-h} \frac{r}{1 - \epsilon^2} \right)^2} -$$

$$- \frac{r}{\vec{b}_g^2} (v_h^2 - v_{g-h}^2) \frac{\epsilon}{1 - \epsilon^2}$$

7.4

Da die rechte Seite nur schwach mit x veränderlich ist, empfiehlt es sich, die Lösung

$$7.4a \quad x_0 = \pm \frac{1}{b^2 g} \sqrt{j_m^2 - 4(v_g^2 - v_h^2 v_{g-h}^2 \cdot \frac{r}{1 - \epsilon_0^2})^2} - \frac{r}{b^2 g} (v_h^2 - v_{g-h}^2) \frac{\epsilon_0}{1 - \epsilon_0^2}$$

mit $\epsilon_0 = G, G, y$

zu berechnen und diese nach der Rekursionsformel

$$7.4b \quad x_n = \pm \frac{1}{b^2 g} \sqrt{\left\{ j_m^2 + 4(v_{g-h}^2 + v_h^2) \frac{(1 + \epsilon_n^2) |x_{n-1}|}{(1 - \epsilon_n^2)^2} \right\}^2 - 4(v_g^2 - v_h^2 v_{g-h}^2 \cdot \frac{r}{1 - \epsilon_n^2})^2} - \frac{r}{b^2 g} (v_h^2 - v_{g-h}^2) \frac{\epsilon_n}{1 - \epsilon_n^2} \quad \text{mit } \epsilon_n = G, G, y + t x_{n-1} \\ (n=1, 2, 3, \dots)$$

schrittweise zu verbessern.

Wir müssen noch die in Kap.V gefundene Näherungslösung $B=0$ für das Hauptmaximum in Koordinaten schreiben. Eigentlich sollten wir dazu das in Kap.V angewandte Verfahren aufgreifen, wonach die Eigenwerte in den Betheschen Zusatzpotentialen beibehalten oder gleich Null gesetzt sind. Der Einheitlichkeit wegen wollen wir die der hier gegebenen Koordinatendarstellung zugrundeliegenden Näherungen $w_{\pm} \rightarrow 0, F_g$ (vgl.6.2) und $0, F_g \rightarrow \frac{1}{2} F_g$ für den Hauptreflex übernehmen. Sie sind im Bereich $|F_g| \lesssim |V_g|$ mathematisch zwar zwecklos, verfälschen jedoch die Resultate nicht. Im übrigen läuft diese Maßnahme wegen $|F_g| \lesssim |V_g|$ längs $B=0$ darauf hinaus, die Eigenwerte $w_{\pm}$ in den Betheschen Summen $\sum$ gleich Null zu setzen. (Siehe auch Fußnote zu Seite 20) Wir bekommen also aus $B=0$:

$$7.5 \quad F_g = \sum d = -\frac{1}{b^2 g} x; \quad x = -\frac{r}{b^2 g} (v_h^2 - v_{g-h}^2) \frac{\epsilon}{1 - \epsilon^2},$$

dazu die Rekursionsformel

$$7.5a \quad x_n = -\frac{r}{b_g^2} (v_h^2 - v_{g-h}^2) \frac{\varepsilon_n}{1 - \varepsilon_n^2} \quad (n=0,1,2,\dots)$$

Damit ist die mathematische Darstellung der Streifenstrukturen abgeschlossen. In welcher Weise und wie stark die drei Zusatzglieder das Bild des ungestörten Zweistrahlfalls verändern, soll Gegenstand der folgenden Diskussion sein.

VIII. Interpretation der Ergebnisse

Um die verschiedenen Anomalieursachen klarzulegen, untersuchen wir einige Grenzfälle, in denen sich nur die eine oder andere Ursache auswirkt. Zuerst behandeln wir den bereits mehrfach erwähnten Fall:

$$1) \quad |\vec{b}_h| = |\vec{b}_{g-h}| \quad \text{und damit } t=0, \quad v_h = v_{g-h} \quad \text{und } \sum^d \equiv 0.$$

In den Gleichungen 7.4 verschwindet jeweils das Glied außerhalb der Wurzel, es ist ferner $\varepsilon_n^2 = y^2$, und wir erhalten:

$$8.1 \quad x_n = \pm \frac{1}{b_g^2} \sqrt{\left\{ j_m + q(v_{g-h}^2 + v_h^2) \frac{1+y^2}{(1-y^2)^2} |x_{n-1}| \right\}^2 - 4(v_{g-h} v_{g-h} \cdot \frac{r}{1-y^2})^2}$$

während 7.5 in $x=0$ übergeht. Im folgenden wollen wir den Einfluß des Zusatzpotentials $\sum^p$ bestimmen. Dazu verweise ich auf Kap.III, in dem die einfache Zweistrahlförmel behandelt worden war. Dort hatten wir die Wanderung der Linien in Abhängigkeit von den Parametern λ, D und v_g analysiert. In den nach Bethe berechneten Formeln 7.4 steht anstelle der konstanten Größe v_g die längs der Linien $x=\text{const}$ variable $A=v_g - \sum^p$. Die Koordinatenfunktion A bewirkt also in 7.4 dasselbe wie ein

längs der Linien $x=\text{const}$ veränderlich gedachtes Potential V_g in den entsprechenden Formeln des einfachen Zweistrahlfalls.

Da wir die V_m als reell voraussetzen (Kristallgitter mit Symmetriezentrum), können wir nach 8.1 die Möglichkeiten $A^2 \lesseqgtr V_g^2$ unterscheiden. Es ist

$$A^2 \gtrless V_g^2 \quad \text{wenn} \quad V_g \times \sum P = \frac{V_g V_h V_{g-h}}{(\vec{b}_h \vec{b}_{g-h})} \cdot \frac{2}{1-y^2} \lesseqgtr 0$$

Wegen seiner großen praktischen Bedeutung wollen wir auf den Fall $V_g > 0$ noch etwas näher eingehen. (In den einfacheren Gittern sind die V_m fast durchweg positiv.) Aus $A^2 \gtrless V_g^2$ folgt dann stets $A \gtrless V_g$ und weiter

$$A \gtrless V_g \quad \text{wenn} \quad \sum P = \frac{V_h V_{g-h}}{(\vec{b}_h \vec{b}_{g-h})} \cdot \frac{2}{1-y^2} \lesseqgtr 0$$

Nun ist

$$\text{sign} \sum P = \text{sign} \frac{1}{1-y^2} \cdot \text{sign}(\vec{b}_h \vec{b}_{g-h})$$

Wegen $\text{sign} \frac{1}{1-y^2} = +1$ innerhalb der Anomaliestrecke (für $|y| < 1$)

und $\text{sign} \frac{1}{1-y^2} = -1$ außerhalb (für $|y| > 1$) können wir daher auch

schreiben:

$$\text{sign} \sum P = \begin{cases} \text{sign}(\vec{b}_h \vec{b}_{g-h}) & \text{innerhalb} \\ -\text{sign}(\vec{b}_h \vec{b}_{g-h}) & \text{außerhalb} \end{cases} \quad \text{der Anomaliestrecke}$$

In der Praxis hängt also die Entscheidung $A^2 \gtrless V_g^2$ (speziell hier identisch mit $A \gtrless V_g$) für einen festen Aufpunkt zumeist allein von dem Winkel zwischen den Vektoren $\vec{b}_h$ und $\vec{b}_{g-h}$ ab. Beschränken wir uns auf Punkte innerhalb der Anomaliestrecke, so ist

$$\sum^P < 0, \text{ d.h. } A > V_g, \text{ wenn } \angle \vec{b}_h, \vec{b}_{g-h} > 90^\circ$$

$$\sum^P > 0, \text{ d.h. } A < V_g, \text{ wenn } \angle \vec{b}_h, \vec{b}_{g-h} < 90^\circ$$

Geometrisch bedeutet $\angle \vec{b}_h, \vec{b}_{g-h} > 90^\circ$, daß die Schnittpunkte $h \times g-h$ und $\bar{h} \times h-g$ (die Indextripel vertreten die Linien) außerhalb des Bereichs zwischen den Linien $\pm g$ liegen; $\angle \vec{b}_h, \vec{b}_{g-h} < 90^\circ$ hingegen heißt, die Schnittpunkte befinden sich zwischen den Linien $\pm g$. Ist $\angle \vec{b}_h, \vec{b}_{g-h} = 90^\circ$, dann liegen sie auf den Linien $\pm g$. In diesem Fall entartet also die Anomaliestrecke zu nur einem Punkt, dem Schnittpunkt $h \times g-h$ bzw. $\bar{h} \times h-g$. Dann versagt auch die Koordinatendarstellung, da die Konstanten s in 7.2 und r in 7.3 unendlich sind. (Vgl. auch S.29)

Kehren wir nun zu Gl. 8.1 zurück. $A^2 > V_g^2$ oder, was dasselbe ist, $|A| > |V_g|$ bedeutet, daß die Beträge $|x|$ der Lösungen 8.1 kleiner sind als die entsprechenden im ungestörten Fall, d.h. die Linien sind zum Hauptreflex $x=0$ hin verschoben; $|A| < |V_g|$ heißt, die Beträge sind größer, und die Linien wandern von der Mitte $x=0$ fort. Wegen $\sum^P \sim \frac{1}{1-y^2}$ ist die Verschiebung längs der Achse $y=0$ (d.i. die Mitte des Anomaliebereichs) minimal und wächst nach beiden Seiten $\pm y$ symmetrisch und monoton an. Die Nebenmaxima und -minima sind deshalb nicht mehr parallele Geraden, sondern im Fall $|A| > |V_g|$ konkav, im Fall $|A| < |V_g|$ konvex gekrümmte Linien, vom Ursprung des Koordinatenkreuzes aus gesehen. An den Enden der Anomaliestrecke, bei $|y| \approx 1$, werden die Formeln 8.1 unbrauchbar, für $|y| > 1$ wechselt $\sum^P$ das Vorzeichen und geht nach anfänglich großen Absolutwerten mit weiter wachsendem $|y|$ gegen Null.*

*Es versteht sich, daß die Formeln 8.1 nicht ohne gewisse Festsetzungen über den Gültigkeitsbereich des Betheschen

Neben den beschriebenen Lagenverschiebungen bewirkt das Zusatzglied $\sum^p$ auch Intensitätsanomalien. An die Stelle des Faktors λDV_g in 2.7 tritt in 6.10 das Produkt $\lambda D(V_g - \sum^p)$. Hier wie dort gewinnen die Nebenmaxima mit dem Anwachsen dieses Faktors an Intensität.

Danach lassen sich die von dem Glied $\sum^p$ herrührenden Anomalien vollständig so formulieren: ist $|A| = |V_g - \sum^p| > |V_g|$, so wandern die Nebenlinien zum Hauptreflex hin, während die Nebenmaxima gleichzeitig an Intensität zunehmen. Ist $|A| < |V_g|$, so rücken die Linien vom Hauptreflex ab, und die Nebenlinien werden schwächer sichtbar. In beiden Fällen ist die Intensität der Linie $F_g=0$ durch die Funktion $J_g = U_0^2 \sin^2 \tau \lambda D(V_g - \sum^p)$ gegeben, und ob diese zu- oder abnimmt, hängt außer von dem Glied $\sum^p$ noch davon ab, in welchem der beiden Intervalle $n\tau < \arg < \frac{2n+1}{2}\tau$ und $\frac{2n+1}{2}\tau < \arg < (n+1)\tau$ das Produkt $\tau \lambda DV_g$ liegt.

Es bleibt noch der Einfluß des Störgliedes z_s zu untersuchen. Es ist linear in $|x|$ und wegen $q = \frac{\vec{b}_g^2}{(\vec{b}_h \vec{b}_{g-h})^2} > 0$ stets positiv und bewirkt daher seiner Stellung in den Formeln 8.1 zufolge eine Verschiebung der Nebenlinien vom Hauptreflex weg. Im Falle $|A| < |V_g|$ verstärkt es also den durch $\sum^p$ verursachten Effekt, im Falle $|A| > |V_g|$ dämpft es diesen. z_s hat wie $\sum^p$ bei $y=0$

* Verfahrens angewendet werden dürfen. Wie schon erwähnt, ist durch die rechnerische Vereinfachung 6.11 die Abhängigkeit der Zusatzpotentiale vom Anregungsfehler F_g weitgehend verlorengegangen. In Wahrheit muß die Grenze der Anwendbarkeit durch eine Funktion beider Variablen x, y gegeben sein und nicht, wie es nach 8.1 scheint, durch die Geraden $|y|=1$. Genauere Erörterungen über die Gültigkeit des Betheschen Formalismus und des Näherungsverfahrens 6.3, 7, 11 folgen im nächsten Abschnitt.

einen minimalen Betrag und wächst zu positiven wie negativen Werten y hin monoton und symmetrisch an. Jedoch bleibt die Störung im ganzen gering, da z_g als klein von zweiter Ordnung anzusehen ist (im Vergleich zu $\sum^p$). Intensitätsanomalien werden wie ersichtlich durch z_g nicht verursacht.

Nach dieser Analyse ist im Fall $V_h = V_{g-h}$ ein Beugungsbild zu erwarten, das neben einem unverschobenen, geradlinigen Hauptreflex (Vgl. Kap. V) leicht gekrümmte Nebenlinien zeigt, die zu beiden Achsen $x=0$ und $y=0$ symmetrisch liegen. (Die Symmetrie zu $x=0$ ist möglicherweise nur im Rahmen der verwendeten Näherungen vorhanden und verschwindet beim Übergang zu höheren. Bei der Bestimmung der Nebenlinien war z.B. das nichtsymmetrische Glied Δ unterdrückt worden.)

Das Gegenstück zum bisher Behandelten ($V_h = V_{g-h}$) bildet der Fall:

$$\text{II) } |V_h| \ll |V_{g-h}|, A \approx V_g \text{ (da dann } |V_h V_{g-h}| \text{ sehr klein)}$$

Die Störungen werden primär durch das Glied $\sum^d$ hervorgerufen. Wir betrachten zunächst die Veränderungen des Hauptreflexes, dessen Lage hier durch die Gleichung $F_g = \sum^d$ gegeben ist (vgl. Kap. V). Im Ursprung verschwindet die Störung, d.h. die Linie ist unverschoben. Beidseits des Ursprungs nimmt $\sum^d$ verschiedene Vorzeichen an, und sein Betrag wächst mit zunehmendem $|y|$. Daraus resultiert eine schwach s-förmig ($\int$) oder spiegelbildlich dazu ($\int$) gekrümmte Kurve, die bei $y=0$ ihren Inversionspunkt besitzt. (Im Fall I. war die Streifenstruktur symmetrisch bezüglich beider Achsen, was die Inversionssymmetrie einschließt.) Bemerkenswert ist, daß ϕ, ϕ, y und t_x stets ungleiche Vorzeichen haben (wegen $\text{sign } r(V_h^2 - V_{g-h}^2) = \text{sign } t$). Man kann daher das Glied t_x neben ϕ, ϕ, y als "Dämpfung" auffassen, es

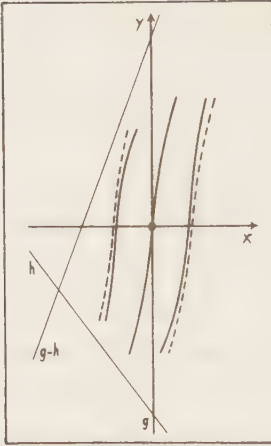


Abb.7: Beispiel nichtsymmetrischer Störung: $V_h \neq V_{g-h}$. Der Hauptreflex schneidet die Kossellinie im Punkt $y=0$. Der Schnittwinkel beträgt i.a. einige Zehntel Grad (hier übertrieben gezeichnet). Seitlich davon zwei Nebenreflexe; gestrichelt die im Text erwähnten Parallelen.

schwächt die durch ϵ, σ, y verursachte Störung ab.

Die Nebenreflexe $\pm n$ -ter Ordnung kann man sich durch Parallelverschiebung des Hauptreflexes in beide Richtungen $\pm x$ um den in grober Näherung konstanten Betrag der Wurzel in Gl. 7.4 entstanden denken. Qualitative Überlegungen, die nur schwer darzustellen sind und deshalb hier übergangen werden sollen, ergeben, daß die wahre Lage der Nebenlinien gegenüber jenen Parallelen noch etwas zum Hauptreflex hin verschoben ist, und zwar für $y=0$ minimal, zu beiden Seiten $\pm y$ monoton zunehmend. (Siehe Abb. 7)

Wo nicht die unter I) und II) aufgeführten speziellen Voraussetzungen über die Fourierkoeffizienten V_m zutreffen, müssen sich die dort besprochenen Anomalien überlagern. Indessen ist dieser allgemeine Fall verwickelt und nur mühsam zu übersehen. Außerdem fehlt es zur numerischen Behandlung meistens an der Kenntnis der Parameter V und D .

Abschließend kann festgestellt werden: das Störglied $\sum^p$ verursacht Lagen- und Intensitätsanomalien gemäß I), das

Störglied $\sum^d$ Lagenanomalien gemäß II). z_g schließlich bewirkt eine Verschiebung des Streifenbildes vom Nullreflex weg. Fall II) ist in der angegebenen extremen Formulierung ($v_h v_{g-h}$ und $\sum^p$ nahezu gleich Null) nur von theoretischem Interesse. Gelegentlich sind unsymmetrische Störungen beobachtet worden, hinreichend deutlich und definierbar; doch bleibt das Glied $\sum^p$ dabei durchaus von Bedeutung (Kap.XI). Fall I) hingegen ist experimentell nahezu exakt realisiert worden. Er hat wegen der Achsensymmetrie des Streifenbildes den Vorzug größerer Übersichtlichkeit. Ein Vergleich mit Beobachtungen folgt im übernächsten Kapitel.

IX. Geltungsbereich und Güte der Betheschen Näherung

Die folgende Diskussion soll über die Brauchbarkeit und den Anwendungsbereich der Betheschen Näherungsmethode Aufschluß geben. Dazu genügt es durchaus, wenn wir uns auf den relativ einfach zu handhabenden Fall I) des vorangegangenen Abschnitts beschränken: $t=0$, d.h. die Linien $\bar{n}$ und $h-g$ kreuzen $\bar{g}$ symmetrisch. Wie schon erwähnt, sind die zur rechnerischen Vereinfachung in Kap.VI eingeführten Mittelwerte $\sum^p$, $\sum^d$ und z_g untauglich, irgendwelche Grenzen der Anwendbarkeit des Betheschen Verfahrens zu bestimmen, weil sie an entscheidender Stelle nicht von x abhängen. (Die "Sperre" $s|x|$ ist "herausgemittelt", siehe S.31) Deshalb muß man auf die ursprünglichen Störglieder zurückgreifen, wie sie in 7.2 geschrieben sind.

Unter der angegebenen Bedingung $t=0$ ist die kritische Größe $A_{\pm} = v_g - \sum_{\pm}^p$, wo unter $\sum_{\pm}^p = v_h v_{g-h} \cdot u^{\pm}(x,y)$ die beiden Potentiale

$\sum_{+}^P$ und $\sum_{-}^P$ gemäß ihrer Darstellung 7.2 zusammengefaßt sind. Im Sinne einer Näherung müssen $|\sum_{\pm}^P|$ klein gegen $|v_g|$ sein. Der Geltungsbereich des Betheschen Verfahrens ist deshalb unbedingt dort zu Ende, wo $|\sum_{\pm}^P| = |v_g|$ wird.

Wenn man zum Ausdruck bringen will, daß das Verfahren um so besser funktioniert, je kleiner $|\sum_{\pm}^P|$ gegen $|v_g|$ ist, so kann man Bereiche bestimmter Güte definieren: auf ihrem Rande soll $\frac{\sum_{\pm}^P}{v_g} = \alpha, |\alpha| < 1$ sein, d.h. die im Punkt (x,y) dem Betrage nach größere der beiden Summen soll gleich αv_g sein. Für alle inneren Punkte soll $|\frac{\sum_{\pm}^P}{v_g}| < |\alpha|$ gelten, d.h. die Größe $v_g - \sum_{\pm}^P$ soll in einem solchen Bereich den Wert $v_g(1-\alpha)$ nicht über- oder unterschreiten. Die analytische Darstellung der Randkurve erfolgt mit Hilfe der Gleichungen

$$9.1a \quad \sum_{\pm}^P = \alpha v_g = v_h v_{g-h} \cdot \frac{4s}{b_g^2} \cdot \frac{1 \pm s \cdot |x|}{(1 \pm s \cdot |x|)^2 - y^2}$$

$$9.1b \quad \frac{1 \pm s \cdot |x|}{(1 \pm s \cdot |x|)^2 - y^2} = \frac{\alpha v_g \vec{b}_g^2}{4s \cdot v_h v_{g-h}} = \pm |c|$$

(Die beiden Vorzeichenpaare vor den Gliedern $s \cdot |x|$ und $|c|$ in 9.1b sind unabhängig voneinander.) Schreiben wir jetzt einfach x statt $|x|$, so bekommen wir mit

$$9.2 \quad y = \pm \sqrt{(1 \pm sx)(1 \pm sx \pm \frac{1}{|c|})}$$

vier gleiche Hyperbeln mit je zwei Ästen (acht Vorzeichenkombinationen!) und den vier Mittelpunkten $x_{\pm} = \pm \frac{1 \pm 2 \cdot |c|}{2s \cdot |c|}$. Ein Beispiel mit willkürlichem Wert α und $(\vec{b}_h \vec{b}_{g-h}) < 0$ ist in Abb.8 skizziert. Darin sind die Linien $\vec{g}, \vec{h}$ und $h-g$ ausgezogen, ihre Spiegelungen an der y-Achse strich-punktiert gezeichnet. In allen Bereichen mit Ausnahme der schraffiert gezeichneten

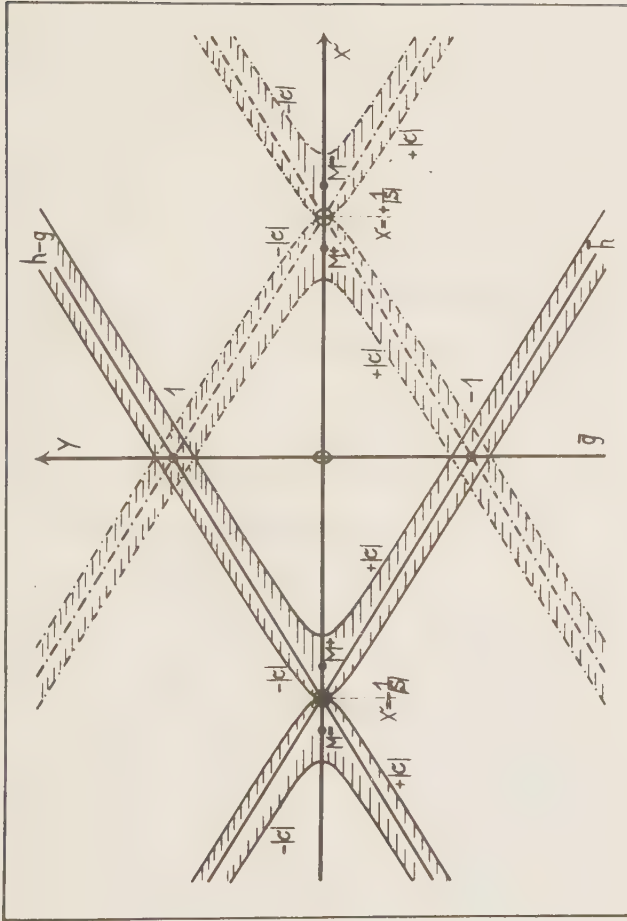


Abb.8: Beispiel zum Geltungsbereich der Betheschen Näherung. $M^{\pm}$ Mittelpunkte der Hyperbeln. $c=3,85$

Streifen ist

$$9.3 \quad \left| \frac{1 \pm sx}{(1 \pm sx)^2 - y^2} \right| \leq |c| \quad \text{und} \quad \left| \frac{\sum^p}{V_g} \right| \leq |a|$$

und dort funktioniert die Bethesche Näherung mit der Güte α oder besser. Davon interessiert hauptsächlich das den Nullpunkt des Koordinatensystems enthaltende zentrale Gebiet. Falls $V_h \neq V_{g-h}$, sieht das Bild ähnlich aus, ist jedoch in der Darstellung wesentlich komplizierter (nur noch Punkt- statt Achsensymmetrie).

Die hier gegebene Gütedefinition sagt freilich nichts über die tatsächliche Abweichung der Theorie von den wahren Verhältnissen. Sie kann nur das Bethesche Verfahren innerhalb gewisser Grenzen (z.B. $|a| < 1$) als brauchbaren Ersatz für den Vierstrahlfall ausweisen. Eine grobe Rechnung zeigt, daß die Bedingung $|a| < 1$ etwa den Forderungen $|F_m|$ und $|F_m - F_g|$ hinreichend groß entspricht. Dabei kann durchaus $|F_m| < |F_g|$ sein.

Die ursprünglichen Betheschen Formeln 4.3,7 hatten wir mit den Gleichungen 6.3,7 abgeändert und die dort definierten Mittel später durch $\sum^p, \sum^d, z_g$ ersetzt. Beides war nur unter den strengerem Voraussetzungen $|F_m|$ nicht zu klein und hinreichend groß gegen $|F_g|$ möglich. Während der Einfluß der Mittelbildung 6.3,7 auf die Resultate 7.4 nicht zu verfolgen ist, nimmt die Abweichung der Größen $\sum^p, \sum^d$ und z_g gegen die exakten Mittel 6.3 mit wachsendem $|F_g|$ ständig zu. Trotzdem kann man die Formeln 7.4 auch für Punkte gelten lassen, in denen $|F_m| < |F_g|$ ist. Je größer nämlich $|F_g|$, um so weniger hängen die Lösungen von den Störgliedern $\sum^p, \sum^d$ und z_g und ihren Fehlern ab.

Diese Tatsache läßt eine Vermutung zu. Angenommen, man

könnte die Streifenlagen exakt darstellen, indem man in 7.4 die Störglieder $\sum^p, \sum^d, z_g$ durch "richtige" Funktionen ersetzt. Gewiß kennt man die Differenzen der "richtigen" und "falschen" Zusatzpotentiale nicht. Es sei aber angenommen, die Differenz bezüglich $\sum^p$ sei längs der in Abb.8 gezeichneten Randkurven (Hyperbeln) konstant. Das würde bedeuten, daß die Formeln 7.4 die besten Werte für diejenigen Punkte der Randkurve geben (gemeint ist wieder die Berandung des zentralen Bereichs, der den Nullpunkt und die eigentliche Anomaliestrecke enthält), für die $|F_g|$ am größten ist, also bei $y=0$. Denn dort hätten die Summe $\sum^p$ und ihr Fehler den geringsten Einfluß auf das Resultat. Diese Überlegungen stehen im Einklang mit den Experimenten, die besagen, daß die Nebenreflexe sich mit wachsendem Abstand vom Hauptreflex in ihrer Lage stetig den ungestörten angleichen.

Andererseits erscheint es gerade für große $|F_g|$ (genauer: $|F_g| \geq |F_{h,g-h}|$) fraglich, ob die den Beugungen h und $g-h$ zugehörigen Partialamplituden im Zweistrahlansatz 4.1 vernachlässigt werden dürfen. Dies ist jedoch ohne Vergleich mit dem Vierstrahlfall nicht zu klären. Sollte ein solcher Vergleich den Ansatz 4.1 auch für große $|F_g|$ als richtig ausweisen, könnte man die Streifenstruktur im Beugungsdiagramm überall dort hinreichend gut mit den Formeln 7.4 beschreiben, wo " $|F_m|$ und $|F_m - F_g|$ nicht zu klein" sind. Andernfalls müßte man sich auf den engeren Bereich " $|F_m|$ und $|F_m - F_g|$ nicht zu klein und $|F_g| < |F_m|$ " beschränken.

X. Vergleich mit vorliegenden Beobachtungen

Zur Illustration der vorangegangenen Ausführungen mögen drei Beispiele aus der Praxis dienen:

1.) Frau MENZEL-KOPP zeigt in ihrer Arbeit⁷⁾ eine an Glimmer beobachtete Intensitätsschwächung des 602 Reflexes zwischen den Linien 331 und $\bar{3}\bar{3}1$ (Abb.9). Nach ihren Angaben ist die Aufnahme mit $\lambda=4,59 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$ (67 kV) und $D=1300 \text{ \AA}$ gemacht worden. Die Kristalldaten sind: $V_{602}=0,47 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}^{-2}$, $V_{331}=V_{\bar{3}\bar{3}1}=1,73 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}^{-2}$, $|b_{331}|=|b_{\bar{3}\bar{3}1}|=0,668 \text{ \AA}^{-1}$. Daraus berechnet sich das Produkt λDV_g zu 0,28. Dieser Wert ist so klein, daß die Nebenreflexe nicht sichtbar sind. Wir wollen nun für den Hauptreflex an einigen Orten y das Produkt λDA und die Funktion $\sin^2 \tau \lambda DA$ bestimmen und den Werten λDV_g und $\sin^2 \tau \lambda DV_g$ gegenüberstellen:

ungestört:		$\lambda DV_g=0,28$	$\sin^2 \tau \lambda DV_g=0,6$
gestört:	$y=0$	$\lambda DA=0,12$	$\sin^2 \tau \lambda DA=0,13$
	$y=\pm 0,5$	$\lambda DA=0,066$	$\sin^2 \tau \lambda DA=0,043$
(außerhalb der Anomaliestrecke)	$y=\pm 1,5$	$\lambda DA=0,41$	$\sin^2 \tau \lambda DA=0,92$

Diese vier von der Theorie angegebenen Werte stimmen recht gut mit dem aus der Aufnahme ersichtlichen Intensitätsverlauf überein.

2.) In derselben Arbeit sind einige Aufnahmen zu finden (Abb.10), die den charakteristischen "Stern" zeigen, der von den drei kristallographisch fast gleichwertigen Linienpaaren ± 060 , ± 331 und $\pm \bar{3}\bar{3}1$ gebildet wird. Es fällt auf, daß an jedem der drei Paare (wenn man jeweils die andern beiden als die stö-

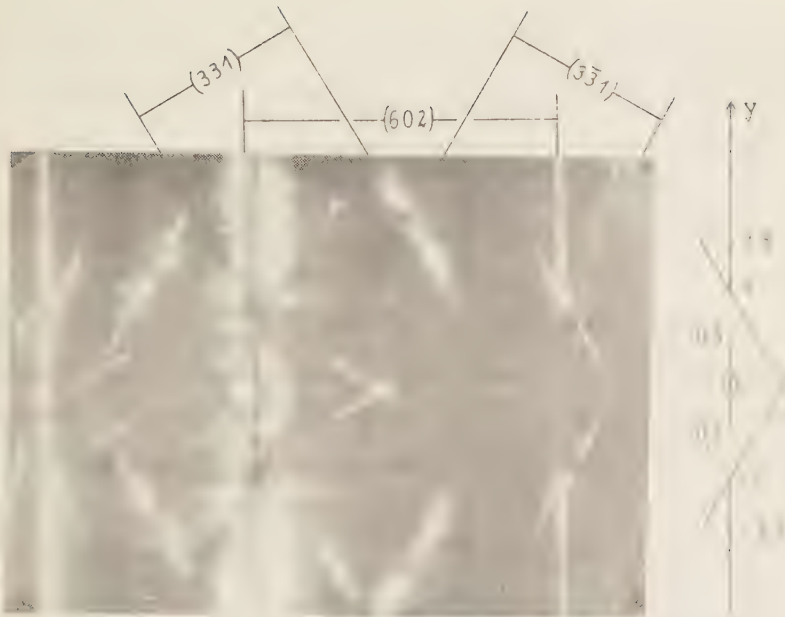


Abb.9: Intensitätsschwächung am (602)-Reflex
(CHR.MENZEL-KOPP, Ann. Physik 9 (6), S.262)

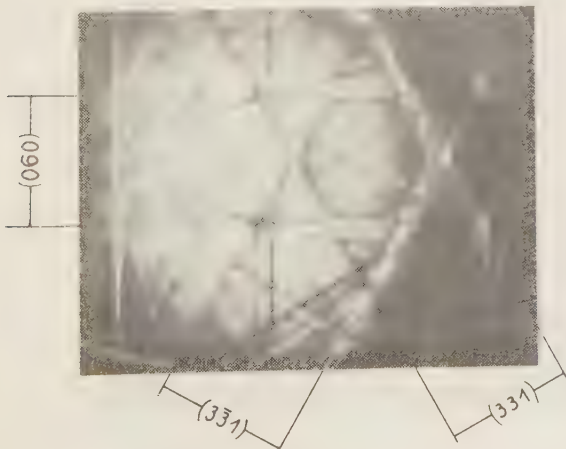


Abb.10: Der "Stern"
(CHR.MENZEL-KOPP, ebenda, S.261)

enden auffaßt) die dunkle Linie auf der Primärseite längs der Anomaliestrecke merklich verschoben ist. In solchen Fällen liegt das Produkt λDV_g noch so weit unterhalb n ($n=1,2,\dots$), daß in den Bereichen, die als nahezu störungsfrei angesehen werden dürfen (also jedenfalls weit außerhalb der Anomaliestrecke), die Kikuchilinie ein absolutes Maximum an Intensität aufweist, längs der Anomaliestrecke aber wegen $A > V_g$ nur noch ein relatives oder ein Minimum. Das absolute Intensitätsmaximum geht auf die benachbarten Reflexe über. Folglich entspricht zwischen den Kreuzungspunkten das dunkle Linienstück auf der Primärseite nicht dem Hauptreflex auf der Beugungsseite, sondern dessen

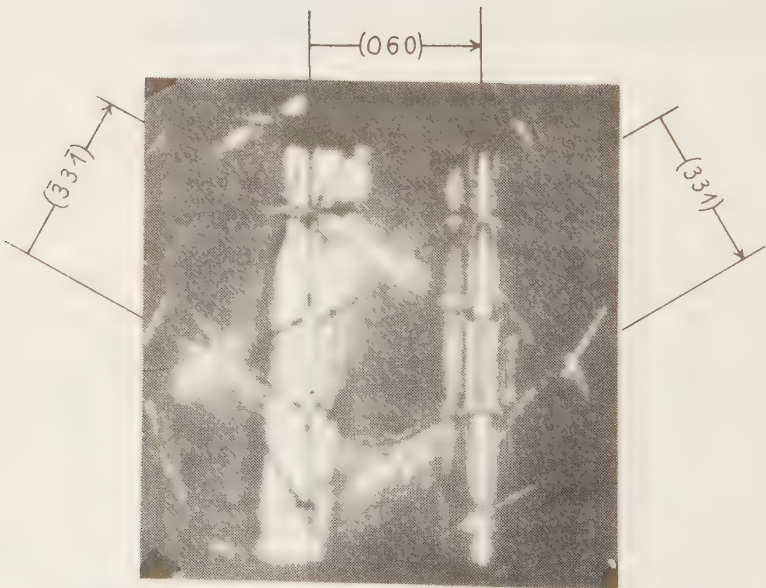


Abb.11: Streifen längs (060)
(CHR.MENZEL-KOPP, Ann. Physik 2 (6), S.266)

erstem Nebenmaximum. Daß die Primärseite keine Aufspaltung symmetrisch zur Kossellinie zeigt wie die Sekundärseite, liegt vermutlich daran, daß die Verteilung der Reflexe und Intensitäten nicht streng symmetrisch zur Kossellinie ist (siehe S.37).

3.) Abb.11 zeigt eine weitere Aufnahme von Frau MENZEL-KOPP⁷⁾. Das spaltförmig ausgeblendete Primärstrahlbündel beleuchtet die 060 Linie eines Glimmerkristalls. Diese wird innerhalb des angestrahlten Bereichs von mehreren Linien gekreuzt, darunter auch von ± 331 und $\pm \bar{3}\bar{3}\bar{1}$, die zusammen mit ± 060 den schon auf Seite 44 erwähnten "Stern" erzeugen. Die Schnittpunkte zerlegen die Linie 060 in einzelne Teilstücke; die Beugung längs eines jeden dieser Abschnitte wird spezifisch von den durch seine Enden laufenden Linien beeinflusst (in geringerem Maße auch von weiter entfernt liegenden). Im Bild sind die Kreuzungspunkte längs 060 durch die Verschiedenartigkeit der Streifenstruktur eindrucksvoll markiert.

Wir wollen nun die Lagen der Linien und die Intensitäten der Maxima mit Hilfe der Formeln 8.1 und 6.10 (mit $\Delta, \sum^d = 0$) längs $-1,5 < y < +1,5$ abtasten*. (Wir können annehmen, daß die Streifenstruktur auch zwischen $1 < |y| < 1,5$, also in den Anschlußgebieten außerhalb der Anomaliestrecke, im wesentlichen noch durch die Störbeugungen 331 und $\bar{3}\bar{3}\bar{1}$ bestimmt wird.) Die Daten sind:

*Über Koordinaten vgl. Kap.VII und Abb.6; je nachdem man die Primär- oder Sekundärseite betrachtet, ist die y-Achse auf die Kossellinie -g oder +g zu legen.

$$\begin{array}{llll}
 g = 060; & h = 331; & g-h = 33\bar{1}; & \lambda = 4,42 \cdot 10^{-2} \text{\AA} \\
 |\vec{b}_g| = 0,665 \text{\AA}^{-1}; & |\vec{b}_h| = |\vec{b}_{g-h}| = 0,668 \text{\AA}^{-1}; & & (=72 \text{ kV}) \\
 v_g = 0,0147 \text{\AA}^{-2}; & v_h = v_{g-h} = 0,0173 \text{\AA}^{-2}; & D = 1000 \text{\AA} & \\
 (\bar{a}_g = 2,2 \text{ V}) & (\bar{a}_h = \bar{a}_{g-h} = 2,6 \text{ V}) & &
 \end{array}$$

In der Tabelle S.49 sind Angaben für die Minima $m=1,2$ und das Maximum $m=1$ sowie für den Hauptreflex enthalten. Unter den Werten für $y=0$ stehen zum Vergleich die aus der einfachen (ungestörten) Formel 2.7 errechneten Beträge. Die Indizes in Klammern zeigen die Anzahl der Näherungsschritte an (z.B.: $x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow \dots \rightarrow x_{(2)}$). Die Rechnung wurde abgebrochen, wenn $\left| \frac{x_n - x_{n-1}}{x_n} \right| \leq 4\%$. Einige Werte sind besonders gekennzeichnet. Erläuterungen dazu folgen.

Das Hauptmaximum hat wie ersichtlich längs der Anomaliestrecke an Breite und Intensität eingebüßt. Es wird von den Minima $m=\pm 1$ ringförmig umschlossen. Diese sind wegen $A > v_g$ zum Hauptreflex hin verschoben (siehe S.35), und zwar bei $y=0,813$ so stark, daß sie dort mit der Kossellinie $x=F_g=0$ zusammenfallen. (vgl. Tabelle S.49). Die Nebenmaxima sind schon nicht mehr so deutlich verlagert, vor allem ist von einer Verstärkung der Störung zu den Enden der Anomaliestrecke hin nichts mehr zu bemerken. Hier wird der Einfluß des in $|x|$ linearen Gliedes z_g schon spürbar, er wirkt der durch $\sum^p$ verursachten Verschiebung zum Zentrum entgegen (siehe S.36). Das Gleiche gilt für die Minima $m=\pm 2$. Sie scheinen für große $|y|$ sogar etwas vom Hauptreflex abgebogen zu sein, d.h. z_g überwiegt dort $\sum^p$. (Die Werte für $|y|=0,8$ können jedoch schon als unbrauchbar angesehen werden. Genaueres erbringt die folgende Festsetzung der für die Güte des Verfahrens kritischen Größe α).

	Minimum m=1	Minimum m=2	Maximum m=1		Hauptreflex
	Lage	Lage	Lage	Intensität J_g/U_0^2	Intensität J_g/U_0^2
$y = 0$	$x_{(1)} = \pm 6,67 \cdot 10^{-2}$ ($\pm 7,78 \cdot 10^{-2}$)	$x_{(1)} = \pm 0,191$ ($\pm 0,194$)	$x_{(1)} = \pm 0,125$ ($\pm 0,130$)	0,275 (0,197)	0,437 = $\sin^2 0,77^\circ$ (0,794 = $\sin^2 0,65^\circ$)
$y = \pm 0,3$	$x_{(1)} = \pm 6,55 \cdot 10^{-2}$	$x_{(1)} = \pm 0,191$	$x_{(1)} = \pm 0,125$	0,283	0,406 = $\sin^2 0,78^\circ$
$y = \pm 0,6$	$x_{(2)} = \pm 6,05 \cdot 10^{-2}$	$x_{(1)} = \pm 0,194$	$x_{(2)} = \pm 0,125$	0,324	0,232 = $\sin^2 0,84^\circ$
$y = \pm 0,8$	$x_{(5)} = \pm 4,17 \cdot 10^{-2}$	$x_{(2)} = \pm 0,214$	$x_{(3)} = \pm 0,133$	0,448	0
$y = \pm 0,813$	$x = 0$	----	----	----	0
$y = \pm 1,2$	$x_{(2)} = \pm 11,2 \cdot 10^{-2}$	----	----	0,067	0,864 = $\sin^2 0,38^\circ$
$y = \pm 1,5$	$x_{(1)} = \pm 8,76 \cdot 10^{-2}$	----	----	0,141	0,976 = $\sin^2 0,55^\circ$

In den Anschlußgebieten außerhalb der Anomaliestrecke ist $A < V_g$. Deshalb sind dort die Nebenlinien vom Zentrum weg verschoben, und zwar bei $|y|=1,2$ recht beträchtlich (Tab.S.49). Das Hauptmaximum erscheint gleichzeitig stark verbreitert und aufgehellt. Bei $|y|=1,2$ hat es seinen Höchstwert noch nicht erreicht (wegen $\arg(|y|=1,2) < \frac{\pi}{2}$), bei $|y|=1,5$ hat es ihn eben überschritten (vgl.Abb.5a,b und Tab.S.49).

Mit dieser qualitativen Auswertung der Tabelle stimmt die Aufnahme sehr gut überein. Sollen die Abstände x direkt nachgemessen werden, so sind sie zuvor auf den Bildmaßstab umzurechnen. Der Abstand d des Linienpaares $\pm g$ im Bild entspricht dem Koordinatenwert $x=2$ (vgl.Abb.6). Daraus folgt:

$$10.1 \quad \xi = \frac{1}{2}dx, \quad \eta = \frac{1}{2}d \left| \operatorname{ctg}(\vec{b}_h, \vec{b}_{g-h}) \right| \cdot y \quad (\text{Vgl.S.28}),$$

wo ξ, η die Bildkoordinaten sind und die Dimension (d) haben. Da die Streifen in der Aufnahme ziemlich breit sind, läßt sich die Lage der Maxima und Minima nur sehr grob ausmessen. Hingegen kann die Länge η , des von den beiden Minima $m=\pm 1$ gebildeten Ringes recht gut festgestellt werden*. Sie beträgt $\eta = (14 \pm 0,5) \text{ mm}$. Aus der Tabelle entnimmt man $|y_d|=0,813$; mit $d=32,5 \text{ mm}$, $\operatorname{ctg} 60^\circ = 0,577$ sowie $\eta = 2|\eta(y=y_0)|$ bestimmt sich der Wert η zu $15,2 \text{ mm}$. Der Unterschied zwischen gemessener und errechneter

*Nebenbei ergibt sich daraus eine Möglichkeit zur Bestimmung der Fourierkoeffizienten, wenn man in Gl.8.1 $m=1$, $x=0$ und $y_0 = \frac{1}{2}y(\eta=\eta_0)$ setzt. Es entsteht dann eine Beziehung zwischen V_g , V_h und V_{g-h} (bei bekannten Gittervektoren $\vec{b}_1$). Man kann entweder nacheinander alle drei Linien $g, h, g-h$ bestrahlen und die Längen η messen oder an einer Linie durch Variation der Parameter λ und D drei Werte η erzeugen.

Länge beträgt rund 10%, ein überzeugendes Ergebnis, wenn man bedenkt, daß die Theorie bei $|y|=0,813$ nicht mehr sonderlich gut ist. Überdies muß berücksichtigt werden, daß die Angaben der Fourierkoeffizienten V_i mit Fehlern von etwa 15% behaftet sein können. Das erklärt auch, warum längs der Anomaliestrecke die Nebenmaxima $m=\pm 1$ laut Theorie schwächer sind als der Hauptreflex (0,275 bzw. 0,441), was dem Augenschein widerspricht. Rechnet man mit $V_g=0,0153$ (statt 0,0147) und $V_h=V_{g-h}=0,0187$ (statt 0,0173), so erhält man schon gleiche Intensität (0,30) für Haupt- und Nebenmaximum.

Schließlich kann man noch einiges über die Güte der Tabellenwerte aussagen. Dazu bestimmen wir die Schnittpunkte der Hyperbeln 9.2 mit den Geraden $y=\text{const}$. Wir erhalten so zu jedem Wert y den im Rahmen der "Güte α " eben noch zulässigen Betrag $|x|$, d.h. die Punkte x,y sind Randpunkte des "Bereichs α ". Für das hier interessierende Gebiet nahe der Linie $F_g=0$ bekommen wir:

$$10.2 \quad |x| = \left| 1 \pm \frac{1}{2c} - \sqrt{\frac{1}{4c^2} + y^2} \right|, \quad |c| = 5,4|\alpha|$$

(Das positive Zeichen gilt außerhalb, das negative längs der Anomaliestrecke.) Legt man den Wert $|\alpha|=0,5$ zugrunde, so folgt:

$$\begin{array}{ll} |x(y=0)| = 0,630 & |x(y=0,8)| \approx 0 \\ |x(y=0,3)| = 0,469 & |x(y=1,2)| = 0,029 \\ |x(y=0,6)| = 0,190 & |x(y=1,5)| = 0,326 \end{array}$$

Demnach liegen alle im gestrichen gezeichneten Rahmen einge-tragenen Punkte der Tabelle außerhalb des Bereichs $|\alpha|=0,5$.

Hält man dagegen den Wert $|\alpha|=0,7$ noch für vertretbar, so ist:

$ x(y=0) = 0,740$	$ x(y=0,8) = 0,060$
$ x(y=0,3) = 0,543$	$ x(y=0,813) = 0,048$
$ x(y=0,6) = 0,260$	$ x(y=1,2) = 0,077$
	$ x(y=1,5) = 0,378$

Aus dem Bereich $|\alpha|=0,7$ fallen nur noch die regulär eingerahmten Werte. Wenn wir $|\alpha|=0,7$ als obere Grenze festhalten, müssen wir alle diese Punkte als unbrauchbar ansehen.

Die hier vorgeführten Rechnungen und Vergleiche zeigen, daß sich das Bethesche Verfahren in Verbindung mit dem Zweistrahlfall recht gut eignet, zahlreiche Einzelheiten der Streifenstruktur in Elektronenbeugungsaufnahmen festzustellen.

Immerhin sind auch am Hauptreflex Verschiebungen beobachtet worden, die nicht mit den in Kap.VIII, Fall II) beschriebenen identisch sind. Sie gehen offensichtlich auf kompliziertere Störungen zurück und können mit der Annahme einfacher Umweganregung ($h, g-h$) nicht geklärt werden. Vielmehr muß man dazu die Bethesche Näherung für mehrere simultan erfolgende Umwegbeugungen formulieren.

XI. Mehrfache Umweganregung

In Kap.IV, Gl. 4.2 war die allgemeine Form der Betheschen Zusatzpotentiale angegeben worden:

$$\sum_w^1 = \sum_m \frac{v_m^2}{F_m - w} ; \quad \sum_w^2 = \sum_m \frac{v_{g-m}^2}{F_m - w} ; \quad \sum_w^p = \sum_m \frac{v_m v_{g-m}}{F_m - w}$$

Wir hatten uns dort auf den Fall zweier Indextripel beschränkt, die einander durch die Beziehung $m=h$, $m'=g-h$ zugeordnet waren. Wir wollen nun mehrere (z.B. n) solcher Paare zulassen und demgemäß $m_v=h_v$ und $m'_v=g-h_v$ ($v=1,2\dots n$) schreiben. Insbesondere lautet die verallgemeinerte Bedingung für die Lage des Hauptmaximums, $B=0$ (s.S.21), ausführlich geschrieben:

$$11.1 \quad F_g = \sum_w^1 = \sum_w^2 - \sum_w^1 = \sum_v (v_{h_v}^2 - v_{g-h_v}^2) \left(\frac{1}{F_{g-h_v} - w} - \frac{1}{F_{h_v} - w} \right)$$

Für $n=1$ hatten wir in Kap.VIII, Nr.II gefunden, daß die Kikuchilinie g längs der Anomaliestrecke und symmetrisch zu deren Mittelpunkt schwach s-förmig ($\int$ oder $\backslash$) verbogen ist. Für $n>1$ ergibt sich nach 11.1 eine Überlagerung solcher Verbiegungen; jedoch gehört nunmehr zu jedem Glied v der Summe in Gl. 11.1, d.h. zu jedem Störlinienpaar $h_v, g-h_v$, eine eigene Anomaliestrecke bisheriger Definition. Betrachtet man den Verlauf der Kikuchilinie längs einer Teilstrecke zwischen den Schnittpunkten mit irgend zwei Störlinien, so kann die Überlagerung der Verbiegungen zur Folge haben, daß die Kikuchilinie auf der ganzen Teilstrecke einseitig von der geometrischen Kossellinie abweicht.

Solche Aufnahmen gut sichtbarer Verschiebungen sind aller-

ings äußerst selten. Wir wollen uns deshalb auf eine allgemeine Diskussion der Formel 11.1 nicht näher einlassen, sondern sogleich mit der Untersuchung einer ausgezeichneten, von J. Lehmppuhl* stammenden Aufnahme beginnen (Abb.12). Sie ist aus der Durchstrahlung eines MgO-Keils entstanden. Einstrahlrichtung ist ungefähr $[446]$, und die Störungen am Reflex $g=\bar{2}4\bar{4}$ fallen sofort ins Auge. Sie werden hauptsächlich durch drei Störlinienpaare $h_v, g-h_v$ verursacht (Abb.13). Nachstehende Tabelle enthält die zugehörigen Indextripel sowie die wichtigsten zur Auswertung nötigen Daten (Vgl. auch Kap. Koordinaten):

Indextripel m	Gittervektor $ \vec{b}_m $	Fourierkoeff. V_m	$(\vec{b}_{h_v}, \vec{b}_{g-h_v})$	$\sigma^{(v)}$	$\sigma^{(v)}$	$\text{ctg} \frac{\sigma^{(v)}}{\vec{b}_{h_v}, \vec{b}_{g-h_v}}$
$g=\bar{2}4\bar{4}$	$1,428\text{\AA}^{-1}$	$0,0100\text{\AA}^{-2}$				
$h_1=220$	$0,674$ "	$0,0343$ "	$-0,227\text{\AA}^{-2}$	-1	+1	-0,242
$g-h_1=\bar{4}2\bar{4}$	$1,428$ "	$0,0100$ "				
$h_2=440$	$1,347$ "	$0,0113$ "	$-1,360$ "	-1	+1	-0,726
$g-h_2=\bar{6}0\bar{4}$	$1,716$ "	$0,0066$ "				
$h_3=\bar{2}\bar{2}0$	$0,674$ "	$0,0343$ "	$-0,680$ "	-1	-1	-0,726
$g-h_3=06\bar{4}$	$1,716$ "	$0,0066$ "				

Danach ist theoretisch zunächst folgendes Bild zu erwarten: die Vektoren $\vec{b}_g$ und $\vec{b}_{h_v}$ (und wegen $\vec{b}_{h_v} + \vec{b}_{g-h_v} = \vec{b}_g$ zwangsläufig auch $\vec{b}_{g-h_v}$) liegen senkrecht zur Richtung $[446]$, d.h. sie gehören sämtlich einer Zonengemeinschaft an; deshalb fallen die Mittelpunkte der drei Anomaliestrecken zusammen. Deren Längen hingegen sind unterschiedlich. Sie verhalten sich in der

*Für die Überlassung dieser bisher nicht publizierten Aufnahme habe ich Herrn Lehmppuhl zu danken.



Abb.12: Durchstrahlung eines MgO-Keils
Beschleunigungsspannung ≈ 50 kV
Kondensoraperturblende 200μ
Einstrahlrichtung $\approx [446]$
Fokus im Kristall

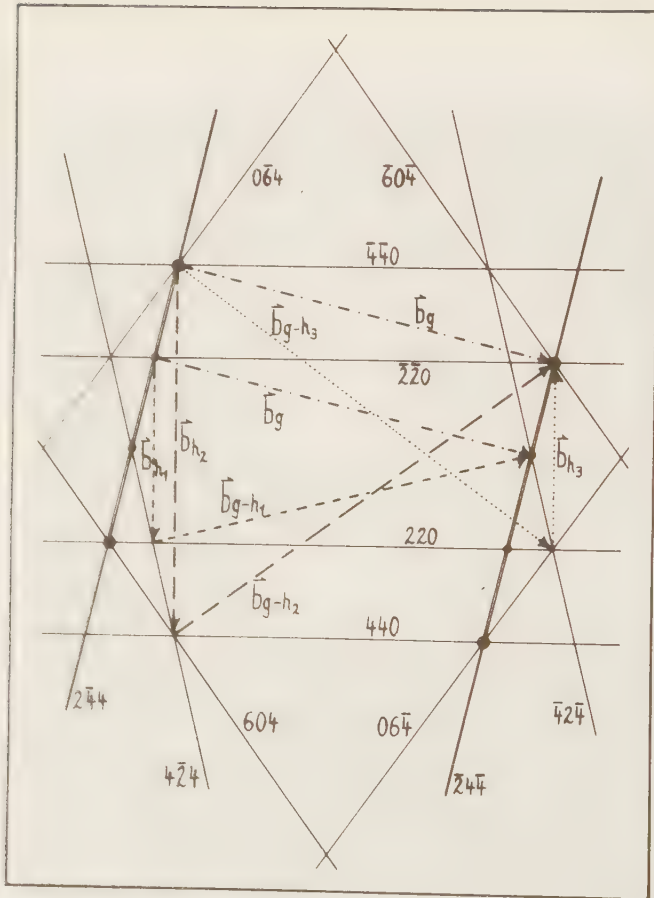


Abb.13: Skizze zum Diagramm Abb.12

Reihenfolge $v=1,2,3$ wie 1:3:3. Die Länge einer Anomaliestrecke ergibt sich nämlich aus einfachen geometrischen Überlegungen allgemein als proportional zu $|\text{ctg}(\vec{b}_h, \vec{b}_{g-h})|$. Die Werte des ctg sind in der Tabelle S.54 eingetragen.

Für den Krümmungssinn der Kikuchilinie ist nach Gl. 7.5 die Größe $\delta, \delta, r(v_h^2 - v_{g-h}^2)$ ausschlaggebend. Ist sie negativ, so

liegt eine reguläre $\int$ -Krümmung vor (dann haben nämlich die Koordinaten x, y aller Kurvenpunkte stets gleiches Vorzeichen, sofern man das Glied tx in 7.5 unberücksichtigt läßt); ist sie positiv, so gibt es die spiegelbildliche ($\int$) Krümmung (x, y haben stets ungleiche Vorzeichen). Aus der Tabelle S. 54 entnimmt man also: starke $\int$ -Krümmung [großer Betrag $r(v_h^2 - v_{g-h}^2)$] für $v=1$, schwache $\int$ -Krümmung für $v=2$ (erstreckt über die dreifache Länge), starke $\int$ -Krümmung für $v=3$ (ebenfalls über die dreifache Länge).

Diese Ergebnisse stimmen mit dem Linienverlauf im Bild überein. Die Störungsstrecke erscheint dort in drei gleiche Teile geschnitten. Der mittlere Teil zeigt die übliche aus 11.1 mit $n=1$ folgende Verbiegung, und zwar wie erwartet $\int$ -förmig. Längs der beiden äußeren Teile ist der Reflex einseitig verschoben: im oberen liegt er ganz in der rechten Halbebene ($F_g < 0$), im unteren ganz in der linken ($F_g > 0$). Offenbar muß man sich den Linienverlauf folgendermaßen entstanden denken: ohne die Störung durch $h_1, g-h_1$ gäbe es eine $\int$ -förmige Verbiegung, die Resultante der Störungen $h_2, g-h_2$ und $h_3, g-h_3$ (Abb. 14a). Das Paar $h_1, g-h_1$ bewirkt eine zur erstgenannten spiegelbildliche Krümmung, mit demselben Inversionspunkt, aber nur auf einem Drittel der Länge; verfolgt man die diese zweite Kurve darstellende Funktion $F_g(y_1)^*$ über die Schnittpunkte der Linien $h_1, g-h_1$ mit der Linie g hinaus (d.h. bei $|y_1| > 1$), so muß sie nach Gl. 7.5 für $|\epsilon_0'' \epsilon_1'' y_1 + t_1 x| > 1$ das Vorzeichen wechseln und für weiter anwachsende $|y_1|$ asymptotisch gegen Null

*Die Koordinate y ist mit der Länge der Anomaliestrecke verknüpft und muß daher zunächst indiziert werden (vgl. Kap. Koordinaten).

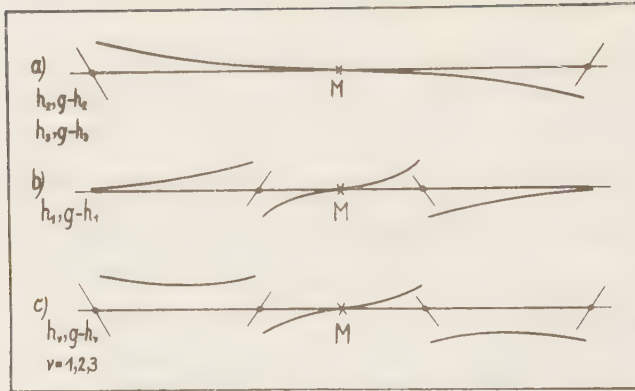


Abb.14: Überlagerung der Lagenanomalien. Schematische Darstellung des Linienvverlaufs bei Wirksamkeit a) der beiden Störlinienpaare $v=2, v=3$; b) des Paares $v=1$ und c) aller drei Paare. Die Abweichungen sind stark übertrieben gezeichnet.

gehen (Abb.14b). Das bedeutet: den beiden äußern Dritteln der erstgenannten $\int$ -Kurve ist an ihren dem Mittelpunkt zugeneigten (inneren) Enden eine dort merkliche Störung $h_1, g-h_1$ überlagert, und zwar verstärkt sie die jeweils vorhandenen Abweichungen. Von einem gewissen Punkt der beiden Drittel bis zu ihren inneren Enden (Schnittpunkten mit der Linie h_1 bzw. $g-h_1$) läuft der Reflex also wieder von der Kossellinie weg, statt sich ihr weiter zu nähern (Abb.14c).

Jenen Punkt geringsten Abstandes sowie die Mindestdistanz selbst wollen wir nun zur Erhärtung dieser Aussagen berechnen. Aus Gl. 11.1 und 7.5a nebst den aus Tabelle S.54 ersichtlichen Daten folgt für den relativen Abstand ($x=1$ entspricht der halben Breite des Bandes g , vgl. Kap. Koordinaten):

$$11.2 \quad x_n = -4,65 \cdot 10^{-3} \frac{y_1 + 3,49x_{n-1}}{1 - (y_1 + 3,49x_{n-1})^2} - \\ - 6,07 \cdot 10^{-5} \frac{y_2 + 0,416x_{n-1}}{1 - (y_2 + 0,416x_{n-1})^2} + 1,63 \cdot 10^{-3} \frac{y_3 - 1,83x_{n-1}}{1 - (y_3 - 1,83x_{n-1})^2}$$

Begnügen wir uns mit der groben Näherung $n=0$, so erhalten wir mit $y_2=y_3=y$ und $y_1=3y$:

$$11.3 \quad x = -4,65 \cdot 10^{-3} \frac{3y}{1-9y^2} + 1,57 \cdot 10^{-3} \frac{y}{1-y^2}$$

Aus $\frac{dx}{dy} = 0$ finden wir $|y_{\min}| = 0,66$; $|x_{\min}| = 5 \cdot 10^{-3}$, d.h.

$|F_g| = 10^{-2} \text{ g}^{-2} = v_g$. Die Lösung $|x_{\min}|$ ist die gesuchte Mindestdistanz der äußeren Drittel der Anomaliestrecke von der geometrischen Kossellinie. Sie wird bei $y=\pm 0,66$ erreicht, d.h. zufällig fast genau in der Mitte der beiden Teilstrecken, und besitzt dort jeweils entgegengesetzt gleiche Werte. Dies erklärt das gut sichtbare Herausrücken im Diagramm, obwohl die Mindestdistanz kleiner als die Linienbreite ist.

Es bleibt noch festzustellen, ob und wie weit die Näherung $B=0$ (s.S.21) zur Bestimmung des Linienverlaufs überhaupt brauchbar ist. Dazu müssen wir am Schluß von Kap.V einsetzen. Die dort angestellten Überlegungen, die uns auf die Maximumsbedingung $B=0$ geführt haben, können wir im wesentlichen auf den Fall mehrfacher Umweganregung übertragen. Die einzige praktische Vergleichsmöglichkeit besteht darin, die Intensitätsformel (z.B. 5.3) numerisch auszuwerten. Dem steht aber folgende Schwierigkeit entgegen: während in der Gleichung $B=0$ Wellenlänge λ und Kristalldicke D nicht vorkommen, würde die nach 5.3 numerisch zu berechnende Lage des Reflexes sehr wohl

von λ und D abhängen, und zwar würde sie gemäß der Funktion $\sin^2 \lambda D \dots$ um einen mittleren Wert periodisch schwanken. Um Einblick in diese Verhältnisse zu gewinnen, haben wir die Intensität an einem Modell (einfache Umweganregung, Daten etwa den $g, h_1, g-h_1$ in der Tabelle S. 54 entsprechend) berechnet, und zwar zunächst für den aus der Gleichung $B=0$ mit $y=0,7$ folgenden Wert x , sodann für ein kleineres und ein größeres x (bei festem y). Die Produkte $\frac{\lambda D}{2}$ sind so gewählt, daß das dickenabhängige Glied $\frac{\varphi'}{\varphi}$ in Gl. 5.5 Extremwerte ungleichen Vorzeichens annimmt (bei $8\text{\AA}^2$ und $25\text{\AA}^2$) und dazwischen (bei $16\text{\AA}^2$) verschwindet. eingetragen ist eine zur Intensität J proportionale Größe (Rechnung nach 6.10):

$\frac{\lambda D}{2} \backslash x, y$	$-7 \cdot 10^{-3}; 0,7$	$-8,65 \cdot 10^{-3}; 0,7$	$-10^{-2}; 0,7$
$8\text{\AA}^2$	0,594	0,577	0,558
$16\text{\AA}^2$	1,136	1,175	1,172
$25\text{\AA}^2$	0,328	0,510	0,560

Man sieht: im ersten Fall ($8\text{\AA}^2$) liegt das Maximum bei $x > -7 \cdot 10^{-3}$, im dritten ($25\text{\AA}^2$) bei $x < -10^{-2}$. Die mittlere Lage ergibt sich mit $\frac{\lambda D}{2} = 16\text{\AA}^2$ zu etwa $x = -9 \cdot 10^{-3}$. Diesen Mittelwert wollen wir zum Vergleich mit der aus $B=0$ folgenden Lösung (in der Tabelle $x = -8,65 \cdot 10^{-3}$) heranziehen. Um eine analytische Darstellung der mittleren Lage zu finden, müssen wir in Gl. 5.5 allgemein $\frac{\varphi'}{\varphi} = 0$ oder $\varphi = \text{const}$ setzen. Mit andern Worten: wir lassen in

$$J_g \sim \frac{f^2 \cdot \varphi^2}{N^2}$$

den von der Kristalldicke D abhängigen Faktor φ , der zwischen Null und eins pendelt, fest und suchen das Maximum der Funktion

$(\frac{f}{N})^2$ auf.

Alle bisher entwickelten Formeln gelten zunächst nur für Kossel-Möllenstedt-Aufnahmen, d.h. für die Durchstrahlung mit primärkonvergentem Bündel, wobei die Weglänge der kohärenten Strahlung gleich der Kristalldicke ist. In Kikuchiaufnahmen resultiert die Intensitätsverteilung aus den vielen kontinuierlich im Kristall verteilten Strahlenquellen. Sie muß deshalb aus einer Integration der Kossel-Möllenstedt-Intensitäten für variable Kristalldicke hervorgehen, d.h. an die Stelle des von der Kristalldicke abhängigen Faktors φ^2 ist ein Integral über φ^2 zu setzen. Die Lage der Nebenmaxima hängt nach den Gln. 6.22, 7.4 wesentlich von der Dicke ab. Solche Nebenreflexe werden also in Kikuchidiagrammen infolge Verwischung nicht mehr auftreten. Die Lage des zentralen Hauptmaximums ergab sich hingegen näherungsweise aus der von der Dicke unabhängigen Bedingung $B=0$. Diese eignet sich demnach auch zur Bestimmung des Linienverlaufs in Kikuchiaufnahmen. Den Beweis der Anwendbarkeit erbringt der folgende Integralansatz für die dickenabhängige Funktion φ : Wir nehmen an, daß die Strahlquellen (unelastische Stoßzentren) homogen im durchstrahlten Kristallkeil verteilt sind. Anstelle vormals $\varphi^2 = \sin^2(\arg) = \sin^2 D \cdot I(F_g)$ (vgl. S. 17) schreiben wir jetzt:

$$\begin{aligned} 11.4 \quad \varphi^2 &= \text{const.} \cdot \int_0^D (D-\zeta) \sin^2 \left[\zeta \cdot I(F_g) \right] d\zeta = \\ &= \frac{1}{4} \text{const} \left(D^2 - \frac{1}{I^2} \sin^2 DI \right) = \text{Const} \left(1 - \frac{\sin^2 DI}{(DI)^2} \right) \end{aligned}$$

Die Konstanten hängen darin nicht von F_g ab. Integrationsvariable ζ ist die Schichttiefe im Kristall, gemessen von der rückseitigen Austrittsfläche der Strahlen. Der Gewichtungsfaktor

(η - ζ) trägt der keilförmigen Gestalt des durchstrahlten Kristallbereichs Rechnung. Obere Integrationsgrenze D ist die größte vom Primärstrahl durchdrungene Dicke. Eine grobe Rechnung zeigt, daß man im Falle $D > 2000\text{\AA}$, der hier wie meistens vorausgesetzt werden darf, das zweite Glied in 11.4 gegen das konstante erste vernachlässigen kann. Der Faktor ϕ^2 ist daher für Kikuchiaufnahmen als nahezu unabhängig vom Anregungsfehler F_g anzusehen, und die Lage des Hauptreflexes ist näherungsweise durch das Maximum der Funktion $(\frac{f}{N})^2$ bestimmbar.

Wir wollen dieses Maximum nun für drei Werte y numerisch ermitteln und das Ergebnis mit den Lösungen aus der expliziten Bedingung $B=0$ vergleichen. An dieser Gegenüberstellung, die nach dem Vorangegangenen für Kossel-Möllenstedt- und Kikuchidiagramme gilt, wird sich die Brauchbarkeit jener Gleichung $B=0$ erweisen.

Wir verwenden für f, N und B die Darstellungen, wie sie aus 6.10 und 7.5 folgen, doch sind alle darin vorkommenden $\sum_i$ und z_i sinngemäß auf drei Indextripelpaare $h_v, g-h_v$ zu erweitern, also:

$$11.5 \quad f = 2(v_g - \sum f); \quad N^2 = (-z_s + \sqrt{(F_g - \sum d)^2 + 4(v_g - \sum f)^2})^2 + \Delta$$

$$F_g = -b_g^2 x = \sum d; \quad x = -\frac{1}{b_g^2} \sum_1^3 r_v (v_{h_v}^2 - v_{g-h_v}^2) \frac{6_0' 6_1' y + t_v x}{1 - (6_0' 6_1' y + t_v x)^2}$$

Im Laufe der Rechnung erweist sich jedoch, daß die Näherung 6.1 für die Eigenwerte $w_{\pm}$ nicht ausreicht. Dieser Mangel offenbart sich besonders an dem unter den z_i größten Zusatzgliede z_s . Die z_i sind nämlich nach 6.1,3 und 7.3 proportional zu $|F_g|$, verschwinden mithin bei $F_g=0$ und sind dort nicht differenzier-

bar. Eine oberflächliche Betrachtung der genauen Eigenwertformeln 4.3 lehrt aber schon, daß es für sehr kleine $|F_g|$ weder in den Eigenwerten selbst, noch in den z_1 eine Proportionalität geben kann. Daraus folgen gerade für sehr kleine $|F_g|$ erhebliche relative Abweichungen der nach 6.1 genäherten z_1 von den genaueren (mit 4.3 gebildeten). Wir ersetzen deshalb 6.1 durch die bessere Näherung:

$$\begin{aligned} 11.6 \quad w_+ &= -\frac{1}{2} \sum_{(0,y)}^s + (V_g - \sum_{(0,y)}^p) \\ w_- &= -\frac{1}{2} \sum_{(0,y)}^s - (V_g - \sum_{(0,y)}^p) \end{aligned}$$

wo $\sum_{(0,y)}^p$ und $\sum_{(0,y)}^s$ nach der alten Methode 6.1, 7.3 mit $x=0$ berechnet sind. Die $\sum^+$ und z_1 schreiben sich jetzt:

$$\begin{aligned} \sum^p &= \sum_1^3 V_{h_v} \cdot V_{g-h_v} \left(\frac{1}{a_v} + \frac{1}{b_v} \right); \quad \sum^d = \sum_1^3 (V_{h_v}^2 - V_{g-h_v}^2) \left(\frac{1}{b_v} - \frac{1}{a_v} \right) \\ z_p &= (V_g - \sum_{(0,y)}^p) \cdot \sum_1^3 V_{h_v} \cdot V_{g-h_v} \left(\frac{1}{a_v^2} + \frac{1}{b_v^2} \right); \\ 11.7 \quad z_d &= (V_g - \sum_{(0,y)}^p) \cdot \sum_1^3 (V_{h_v}^2 - V_{g-h_v}^2) \left(\frac{1}{b_v^2} - \frac{1}{a_v^2} \right); \\ z_s &= (V_g - \sum_{(0,y)}^p) \cdot \sum_1^3 (V_{h_v}^2 + V_{g-h_v}^2) \left(\frac{1}{a_v^2} + \frac{1}{b_v^2} \right) \\ \text{mit} \quad a_v &= \frac{1}{F_{h_v} + \frac{1}{2} \sum_{(0,y)}^s}, \quad b_v = \frac{1}{F_{g-h_v} + \frac{1}{2} \sum_{(0,y)}^s} \end{aligned}$$

Die Rechnung wurde für $y=0,1$; $y=0,25$ und $y=0,67$ durchgeführt (wegen $y_2=y_3=y$ und $y_1=3y$ entsprechen diese Werte im einsindiierten ($v=1$), dominierenden Störliniensystem den Werten 0,3; 0,75 und 2,0. Bei 0,3 sind die Anomalien noch als schwach, bei 0,75 bereits als stark anzusehen, und bei $y_1=2$, in der Mitte der äußeren Teilstrecken, sind sie noch etwa ebenso stark wie die von den beiden Paaren $v=2,3$ herrührenden). Die Ergebnisse

sind in folgender Tabelle zusammengefaßt:

y=	0,1	0,25	0,67
$x \cdot 10^3$ (aus $B=0$)	-1,25	-5,76	+4,90
$x_{\max} \cdot 10^3$ (aus $J_g = \frac{f^2}{N^2}$)	-1,05	-4,80	+4,80
$\frac{x - x_{\max}}{x_{\max}} (\%)$	+20	+20	+2

Die Differenz der beiden Werte x und $x_{\max}$ beläuft sich in den beiden ersten Spalten auf jeweils etwa 20%, in der dritten auf etwa 2%. Es darf daher angenommen werden, daß die Abweichungen nicht mehr als 20% betragen, sofern die Störungen nicht stärker als bei $y=0,25$ sind.

Daß die Einführung der Näherungen 11.6 die Gleichung $B=0$ nicht wesentlich ändert, zeigt eine numerische Nachprüfung des oben berechneten Wertes $|y_{\min}|=0,66$ (S.59), für den der Reflex minimalen Abstand von der Kossellinie hat, mit der Gleichung $F_g = \sum^d$, wo $\sum^d$ nach 11.6 eingesetzt ist. Bei einem (für $\sum^d$) angenommenen Abstand von $x=5 \cdot 10^{-3}$ (vgl.S.59) ergibt sich $|y_{\min}|=0,68$ (statt seinerzeit 0,66).

Damit ist an einem einfachen und übersichtlichen Beispiel demonstriert worden, daß die in den vorangegangenen Abschnitten entwickelten Näherungen ohne besondere Schwierigkeiten auf den Fall mehrfacher Umweganregung ausgedehnt werden können; daß echte Lagenanomalien, d.h. Verschiebungen des (Haupt-) Reflexes, tatsächlich vorkommen, und zwar als Folge mehrerer unsymmetrischer Störungen, und daß solche mit der Gleichung $B=0$ recht gut beschrieben werden können, da die Linienbreite in den Elektro-

nenbeugungsaufnahmen Differenzen in der Größenordnung von 20% und größere i.a. noch nicht erkennen läßt.

Zusammenfassung

Kikuchilinien zeigen in manchen, durch kreuzende Störlinien begrenzten Gebieten des Beugungsdiagramms Intensitäts- und Lagenanomalien. Intensitätsanomalien können als Folge einfacher Umweganregungen, $h+(g-h) \rightarrow g$, erklärt werden. Lagenanomalien sind (abgesehen von Unregelmäßigkeiten möglicher Nebenmaxima) deutlich nur in Fällen komplizierterer Störungen beobachtet. Zunächst wird untersucht, wie weit auch Lagenanomalien mit einfacher Umweganregung entstehen können. In der Betheschen Intensitätsformel wird der Einfluß mäßig störender Nebenbeugungen erfaßt. Durch Differentiation nach Strahlrichtungskoordinaten kann die Lage der Intensitätsmaxima und damit der Linienverlauf bestimmt werden. Dem komplizierten Ergebnis der theoretischen Entwicklung läßt sich entnehmen: symmetrisch kreuzende Störlinien h und $g-h$ können nur unbeobachtbar kleine Lagenverschiebungen der Hauptlinie g hervorrufen; nicht symmetrisch kreuzende verursachen darüber hinaus noch schwache s-förmige Verbiegungen. Begleitende Nebenmaxima zeigen durchweg Krümmungen und Verschiebungen, z.T. komplizierter Natur. Diese Resultate werden anhand einiger Beugungsaufnahmen soweit möglich nachgeprüft.

Die Erweiterung der Theorie auf mehrfache Umweganregungen, $h, +(g-h,) \rightarrow g$, erweist dann die Möglichkeit auffälliger Lagenverschiebungen auch am Hauptreflex: Kikuchilinien können in Gebieten, die durch Kreuzungspunkte mit Störlinien begrenzt sind, einseitig und gut sichtbar von der geometrischen Kossellinie abdrücken. Dieses Verhalten wird am Beispiel einer Kikuchiaufnahme studiert.

Literaturverzeichnis

- 1) S.KIKUCHI, Naturwiss. 17, S.175 (1929)
- 2) W.KOSSEL u. G.MÖLLENSTEDT, Ann.Physik 36 (5), S.113 (1939)
- 3) G.MÖLLENSTEDT, Ann.Physik 40 (5), S.39 (1941)
- 4) W.KOSSEL u. G.MÖLLENSTEDT, Ann.Physik 42 (5), S.287 (1942)
- 5) I.ACKERMANN, Ann.Physik 2 (6), S.19 (1948)
- 6) H.PFISTER, Ann.Physik 11 (6), S.239 (1953)
- 7) CHR.MENZEL-KOPP, Ann.Physik 2 (6), S.259 (1951)
- 8) E.FUES u. E.H.WAGNER, Z.Naturforschg. 6a, S.1;79 (1951)
- 9) E.H.WAGNER, Z.Naturforschg. 6a, S.133 (1951)
- 10) K.KAMBE, J.Phys.Soc.Japan 12, S.13 (1957)
- 11) H.FENGLER, Z.Naturforschg. 16a, S.1205 (1961)
- 12) M.v.LAUE, Materiewellen und ihre Interferenzen,
Akad.Verlagsgesellschaft, Leipzig 1948, S.223ff
- 13) H.BETHE, Ann.Physik 87 (4), S.55 (1928)

Die vorliegende Arbeit wurde in der Zeit von 1961 bis 1964 im Institut für Elektronenmikroskopie am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft in Berlin-Dahlem unter Leitung von Herrn Prof. Dr. E. Ruska angefertigt.

Herrn Priv.-Doz. Dr. H. Niehrs danke ich für den Vorschlag der Arbeit sowie für sein Interesse an ihrer Durchführung und seine stete Bereitschaft, sie durch Ratschläge und Anregungen zu fördern. Besonderen Dank schulde ich Herrn Prof. Dr. E. Ruska für die mir gewährte finanzielle Unterstützung.

Lebenslauf

Am 21.5.1937 wurde ich als Sohn des Verlagsbuchhändlers Hans Thielen und seiner Ehefrau Barbara, geb. Kummer, in Berlin-Schmargendorf geboren.

In den Jahren 1943 bis 1947 besuchte ich die Grundschule in Lehnin / Mark und Berlin-Steglitz und anschließend das humanistische Gymnasium zu Berlin-Steglitz. Hier legte ich im Februar 1956 die Reifeprüfung ab. Im Sommersemester desselben Jahres begann ich an der Freien Universität Berlin mit dem Physikstudium. Im Februar 1960 bestand ich die Diplomvorprüfung in Physik. Danach studierte ich zwei Semester in Bonn. Im Februar 1961 begann ich im Institut für Elektronenmikroskopie am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft in Berlin mit Arbeiten zur vorliegenden Dissertation.

